

T.C.
DİCLE ÜNİVERSİTESİ
Fen Bilimleri Enstitüsü

SÜPER YOĞUN LAZER ALANI İLE ETKİLEŞEN BİR ELEKTRONLU
ATOMİK SİSTEMLERDE EŞİK ENERJİ ÜZERİ İYONLAŞMA SÜRECİNDE
DİPOL OLMAYAN VE GÖRELİ ETKİLER

Esen ARSLAN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

(FİZİK ANABİLİM DALI)


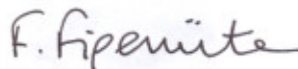

DİYARBAKIR

AĞUSTOS-2007

T.C
DİCLE UNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ MÜDÜRLÜĞÜ
DİYARBAKIR

Esen Arslan tarafından yapılan “Süper Yoğun Lazer Alanı ile Etkileşen bir Elektronlu Atomik Sistemlerde Eşik Enerji Üzeri İyonlaşma Sürecinde Dipol Olmayan ve Göreli Etkiler” konulu bu çalışma , jürimiz tarafından FİZİK Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir

Jüri Üyesinin

<u>Ünvanı</u>	<u>Adı Soyadı</u>
Başkan: Prof. Dr. Sezai Oğraş	
Üye : Yrd. Doç. Dr. F. Figen Binbay	
Üye : Yrd. Doç Dr. Emine Meşe (Danışman)	

Tez Savunma Sınavı Tarihi: 16/08/2007

Yukarıdaki bilgilerin doğruluğunu onaylarım.

.../...../2007

Prof. Dr. Necmettin PİRİNÇÇİOĞLU

ENSTİTÜ MÜDÜRÜ

(MÜHÜR)

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR	III
AMAÇ	IV
ÖZET	V
SUMMARY	VI
1.GİRİŞ	1
2. BİR ELEKTRONLU ATOMLARIN ELEKTROMANYETİK İŞİNIMLA ETKİLEŞMESİ [3]	3
2.1 ELEKTROMANYETİK ALAN	3
2.2 ELEKTROMANYETİK ALANDA YÜKLÜ PARÇACIKLAR	6
2.3 GEÇİŞ ORANI VE ATOMİK SÜREÇLER	8
2.3.1 SOĞURMA	10
2.3.2 UYARILMIŞ YAYINLAMA	11
2.3.3 İYONLAŞMA	15
2.3.3.1 DİPOL YAKLAŞIKLIĞINDA İYONLAŞMA ORANI	20
3. LAZER ALANINDA İYONLAŞMA SÜREÇLERİ	23
3.1 ÇOKLUFOTON İYONLAŞMASI (MPI).....	23
3.2 EŞİK ÜZERİ İYONLAŞMA (ATI).....	25
4. ÇOKLUFOTON SÜREÇLERİNDE DİPOL OLMAYAN ETKİLER	30
4.1 GÜÇLÜ LAZER ALANINDA MANYETİK ALAN ETKİLERİ.....	30
4.1.1 MANYETİK ALAN ETKİLERİNİN KATKI SUNDUĞU BÖLGE	32
4.2 ELEKTRİK VE MANYETİK ALANIN DÜZLEM DALGAYA ETKİLERİ.....	37
4.3 ETKİLEŞME HAMILTONYENİ.....	39
5. GÖRELİ ETKİLER	40
5.1 KLEİN-GORDON DENKLEMİNDEN DİRAC EŞİTLİĞİNE GEÇİŞ.....	40
5.2 ZAMAN-GELİŞİM İŞLEMCİSİ VE SCHRÖDİNGER DENKLEMİ.....	56
5.2.1 ZAMAN-GELİŞİM İŞLEMCİSİ	56
5.2.2 SCHRÖDİNGER DENKLEMİ.....	60
5.2.3 ENERJİNİN ÖZKETİ	62
5.3 DYSON SERİSİ.....	63
5.4 GÜÇLÜ ALAN YAKLAŞIKLIĞINDA ZAMANA BAĞLI DİPOL ETKİ	66

5.4.1 UZUNLUK AYAR DÖNÜŞÜMÜNDE SADDLE POİNT METOT.....	71
SONUÇ	77
EKLER	79
1.SADDLE POİNT METOD	80
KAYNAKLAR.....	83
ŞEKİL LİSTESİ	87
ÖZGEŞMİŞ	89

TEŞEKKÜR

Bu çalışmanın oluşmasında katkıda bulunan danışmanım Yrd. Doç. Dr. Emine MEŞE'ye, çalışmalarım boyunca yardım ve ilgilerini gördüğüm aileme ve arkadaşlarıma teşekkür ederim.

AMAÇ

Bu çalışmanın amacı, güçlü lazer alanı ile bir elektronlu atomik sistemlerin etkileşmesi sonucunda iyonlaşma süreçlerini, özellikle eşik üzeri iyonlaşma sürecinin ne olduğunu anlamak ve bu olayın lazer alanının yoğunluğu ve frekansının büyüklüğüne göre farklı bölgelerde değişimini ve bu konuda yapılan çalışmaları tanıtmaktır.

ÖZET

Bu çalışmada, yoğun lazer alanında bir elektronlu atomik sistemlerde eşik üzeri iyonlaşma incelendi. Bu inceleme için öncelikle bir elektronlu atomik sistemin elektromanyetik alan ile etkileşmesi ve bu etkileşme esnasında olası süreçlerin neler olduğu ve bu süreçlerden biri olan iyonlaşma süreci tanımlandı. Etkileşme sadece bir tek foton ile değil bir lazer alanında olması nedeniyle oluşan farklı tip iyonlaşma süreçlerinin ne olduğu ve nasıl gerçekleştiği anlatıldı: çoklufoton iyonlaşması ve eşik üzeri iyonlaşma. Gerek çoklufoton iyonlaşması gerekse eşik üzere iyonlaşma süreçleri lazer alanının şiddetine ve frekansına bağlı olarak farklılık göstermektedir. Düşük yoğunluklu lazer ile etkileşen sistemler için dipol yaklaşımı kullanılabilir. Dipol yaklaşımının sınırları tezde tartışıldı. Daha yüksek lazer yoğunluğuna sahip etkileşme süreçlerinde dipol olmayan etkileşme teriminin etkisi incelendi ($1/c$ - c ışık hızı olmak üzere basamağında manyetik alan etkisini içeren terim). Göreli etkilerin dikkate alınması gerektiği bölge belirlendi. Bu bölgelerde dipol yaklaşıklığı, manyetik alan ve göreli değişim olmak üzere üç bölgede eşik üzeri iyonlaşma oranları karşılaştırıldı. Dipol olmayan ve göreli etkilerin incelendiği bu bölgede güçlü atom yaklaşımı ve bu yaklaşımdaki sonuçlar gösterildi.

SUMMARY

In this study, above threshold ionization in one-electron system in intense laser field is investigated. Firstly, interaction of one electron system with an electromagnetic field is investigated and the processes particularly ionization, is investigated. Since the interaction occurs in a laser field not only single photon ionization but also multiphoton ionization and above threshold ionization processes are defined. Both later processes depend on the intensity and frequency of the field. At low intensity dipole approximation is valid. Thus, this limit is discussed and non-dipole effects and relativistic effects at higher intensity are investigated within strong field approximation (SFA).

1. GİRİŞ

Bir elektronlu sistem üzerine ışığın düştüğü düşünülürse ve gelen fotonun enerjisi yeterli bir şekilde ise bu foton bir atom tarafından soğurulur. Bu durumda atom uyarılmış duruma yükselir. 1917 yılında Einstein uyarılmış bir atomun daha alçak bir duruma foton yayınlarken iki farklı biçimde geçebileceğini göstermiştir. Bunlardan birincisi, atomun kendiliğinden enerji yayınlarken alçak enerji durumuna geçmesi, diğeri ise uygun frekanslı bir elektromanyetik ışınım ile tetikleme yapılarak enerji yayınlamasının sağlanmasıyla atomun alçak duruma geçmesidir. Tetiklemeyle geçiş sağlama olarak bilinen ikinci aşama, uyarılmayla yayınlama olarak da bilinir. Bu lazer çalışmasının esasıdır. Belirli frekanstaki ışınım enerjisi $E = h\nu = hc/\lambda$ enerjili fotonlardan ibarettir. Işınımın frekansını elde etmek için elektromanyetik ışınım enerjisinin kuantumlanmış olduğu ve $h\nu$ enerjisi taşıyan ν frekanslı fotonlar vasıtasıyla taşındığı varsayılır. Buna göre ν frekanslı foton bir atom tarafından soğurulursa enerjinin korunumu

$$E_a - E_b = h\nu$$

olmasını gerektirir. Burada E_a ve E_b , $E_b > E_a$ olmak üzere ilk ve son yörüngelerdeki atomun enerjileridir. Benzer şekilde atom E_b enerji durumundan daha alt bir enerjili E_a durumuna geçerse yayınlacağı fotonun frekansı yukarıdaki Bohr frekans bağıntısı ile verilir. Bu aşamanın çok önemli bir yanı vardır ki bu da yayınlanan fotonun, uyarı yapan ışınım ile fazı, kutuplanması ve ilerleme doğrultusu aynıdır. Bu nedenle yayınlanan fotonun, gelen fotonla aynı ışınım doğrultusunda olduğu ve gelen dalgaya katılarak akı yoğunluğunu genişletme eğiliminde olduğu söylenir. Atomların çoğu normal olarak taban durumlarında olduklarından, kendiliğinden ışımaya yapmak için soğurma, uyarılmayla yayınlama yapmaktan çok daha olasıdır.

Uyarılmış yayınlama halinde her geçişte bir fotona N foton içeren bir kip eklenir. Bu eklenen tek foton öteki fotonlarla tamamen aynı faz ve aynı kutuplanmaya sahiptir. Buradan şu genellemeye gidebiliriz. Eğer bir lazer etkisi tek bir fotonla başlatılırsa, her bir geçişte bir foton üretilecek ve N tane geçiş sonrasında $(N+1)$ tane foton aynı fazda kalacak ve elektromanyetik ışınımın aynı kipiye katkı sağlayacaktır.

Güçlü lazer alanındaki atomların doğrusal olmayan farklı iyonlaşma süreçleri vardır. Elektron başlangıçta taban enerji seviyesindeyken birçok foton soğurarak yüksek kinetik enerji yardımıyla iyonlaşır. Farklı süreçlerdeki iyonlaşmalar için güçlü lazer alanında üst seviyelere uyarılan atomlar, enerjilerini verdikten sonra salınabilirler. Bu salınma ardışık ya da kendiliğinden gerçekleşen bir süreçtir. İyonlaşma neredeyse bütün güçlü lazer alanı ile atom arasındaki etkileşim süreçlerinde daima meydana gelir. Bu yüzden iyi bir anlayışa ve uygun iyonlaşma modeline sahip olmak önemlidir [1].

Bu çalışmada geçen “güçlü” kelimesi birkaç değişik yolla tanımlanabilir ancak temel olarak 10^{12} W/cm² den daha büyük alan şiddeti anlamına gelmektedir. Güçlü alanlar çizgisel olmayan süreçleri içerir. Ayrıca, klasik ponderomotiveyi güçlü lazer olmadan gözlemlemek çok zayıf olup bu düşünce gücü önemli bir faktör olmuştur. Güçlü alan fiziğinin son yıllarda yaygın olarak çalışılan bir alanı çoklu foton iyonlaşmasıdır (MPI). Bu birden fazla fotonun eş zamanlı soğurması tarafından bir atom ya da molekülün iyonlaşmasıdır. Elektronlar sayılabildiği zaman, kaç tane fotonun MPI sürecinde soğurulduğu görülür ve böylece elektronların enerjisi ölçülebilir. Bu yapıldığı zaman, bazı atomların bağlanma enerjisi için gerekli olan enerjiden daha fazlasını soğurdukları görülür. Bu yeni olguda “Eşik Üzeri İyonlaşma” (ATI) olarak adlandırılır. Bu olguyu ise soğurulan fotonların sayısı ile ilişkilendirerek, iyonlaşma için gerekli olan N foton sayısından daha fazla fotona ihtiyaç olduğu şeklinde bir yaklaşım ile açıklanmıştır. Böylece eşik üzeri iyonlaşma (ATI), “foton iyonlaşması” olarak bilinen güçlü elektromanyetik alanlarda meydana gelen bir süreçtir. Bazı ATI özellikleri en düşük mertebe tarafından açıklanamaz ancak birçok yaygın teorik gelişimlerle sonuçlanır [2].

Eşik üzeri iyonlaşmanın analitiksel teorisinin genellemesi için, dipol olmayan ve görelî düzeltmeler hesap edilmektedir. Dipol yaklaşıklığı, dipol olmayan ve görelî etkilerin hesaplamaları karşılaştırıldığında yüksek foton enerjisinde atmaların şekli ve frekansı, lazer alanının şiddetine bağlı olduğu gibi kesinti noktasının durumuna da bağlıdır. Bu etkinin sebebi, elektronun tekrar salınım yönünde sürüklenmesidir. Özellikle görelî düzeltmeler düzlük ve karakteristik bir sınır noktasına dayanan fotoelektron tayfinin yüksek enerji parçasında yer alır. Fotoelektron spektrumunun yüksek enerji parçasına yerleştirilmesi sonucu düz ve kesikli enerji oluşur.

2.BİR ELEKTRONLU ATOMLARIN ELEKTROMANYETİK IŞINIMLA ETKİLEŞMESİ [3]

Bu bölümde elektromanyetik alanların etkisinde yüklü parçacıkların hareketlerini anlatmakla ilgileneceğiz. Yüklü parçacıkların elektromanyetik alanlarla etkileşimlerini betimleyen Hamiltonyen işlemcileri, klasik Hamiltonyen fonksiyonundaki kanonik koordinat çiftlerinin, bunlara karşılık gelen Hermitsel işlemciler ile değiştirilmesiyle başarılır. Bu Hamiltonyen işlemcilerinde elektromanyetik alanlar \vec{E} (elektrik) ve \vec{B} (manyetik) alanları değil, Φ (skaler) ve \vec{A} (vektör) potansiyelleri ile temsil edilirler. Aynı zamanda verilen \vec{E} ve \vec{B} alanları potansiyelleri tek olarak belirleme imkânı tanımaz: birbirlerine ayar dönüşümleri ile bağlı tüm aynı \vec{E} ve \vec{B} alanlarını ve dolayısıyla aynı fiziksel sistemi tanımlar [4].

2.1 ELEKTROMANYETİK ALAN

Boşlukta klasik elektromanyetik alan Maxwell denklemlerini sağlayan \vec{E} elektrik ve \vec{B} manyetik alanlarla tanımlanır ve

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = -\vec{\nabla}\phi(\vec{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t}\vec{A}(\vec{r}, t) \quad (2.1.1)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}, t) \quad (2.1.2)$$

bağıntılarıyla bulunur. Bu bağıntılarda Φ ve \vec{A} tarafından elde edilir. Potansiyeller yukarıdaki denklemlerde tam olarak tanımlanmaz. Yani \vec{E} ve \vec{B} de , $\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}\chi$ ve $\phi \rightarrow \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t}$ değişimleri altında değişmezdir. Burada χ herhangi skaler potansiyeldir. Ayar değişmezliğinin bu özelliği, \vec{A} üzerinde daha başka bir koşul koyulmasına izin verir. Bu koşul

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \quad (2.1.3)$$

dir. \vec{A} bu koşulu sağladığı zaman Coulomb ayarı kullanılıyor demektir. Maxwell denklemlerinde \vec{A} (Φ , \vec{E} ve \vec{B} gibi)

$$\nabla^2 \vec{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} = 0 \quad (2.1.4)$$

dalga denklemini sağlar. Bir ışınım alanı için Maxwell denklemlerinin en genel çözümü $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ ve $\Phi = 0$ gibi potansiyeller cinsinden ifade edildiği için skaler potansiyel $\Phi = 0$ olarak alınır.

ω açısal frekansına ($\nu = \omega/2\pi$) karşılık gelen (2.1.3) ve (2.1.4) denklemlerinin tek renkli düzlem dalga çözümü

$$\begin{aligned} \vec{A}(\omega; \vec{r}, t) &= 2\vec{A}_0(\omega) \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \delta_\omega) \\ &= \vec{A}_0(\omega) \left[\exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \delta_\omega)] + k.e \right] \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

gerçel vektör potansiyelini gösterir. \vec{A}_0 gerçel vektördür ayrıca ışınımın şiddeti ve kutuplanmasını tanımlar. \vec{k} yayılma vektörü, δ_ω gerçel fazdır ve $(k.e)$ karmaşık eşleniğini göstermektedir.

$$\vec{k} \cdot \vec{A}_0(\omega) = 0 \quad (2.1.6)$$

olursa denklem (2.1.3) sağlanır. Burada $\vec{k}, \vec{A}_0(\omega)$ 'ya diktir ve dalga enine dalgadır. Denklem (2.1.4) $\omega = kc$ olmak koşuluyla sağlanır. Buradaki k, \vec{k} yayılma vektörünün büyüklüğüdür.

Denklem (2.1.5) vektör potansiyeline eşlik eden \vec{E} (elektrik) ve \vec{B} (manyetik) alanları (2.1.1) ve (2.1.2) denklemlerinde sırasıyla

$$\begin{aligned} \vec{E} &= -2\omega A_0(\omega) \hat{\epsilon} \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \delta_\omega) \\ \vec{B} &= -2A_0(\omega) (\vec{k} \times \hat{\epsilon}) \sin(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \delta_\omega) \end{aligned} \quad (2.1.7)$$

ile verilir. $\vec{A}_0(\omega) = A_0(\omega) \hat{\epsilon}$ şeklinde yazılır. \vec{E} elektrik alanın doğrultusu, ışınımın kutuplanmasını tanımlayan $\hat{\epsilon}$ gerçel birim vektörü boyuncadır. Buna kutuplanma vektörü

denir. Denklem (2.1.7)'de hem \vec{E} 'nin hemde \vec{B} 'nin \vec{k} yayılma vektörüne ve birbirlerine dik olduklarını gösterir.

Elektromanyetik alanın kuantumlu anlatımında, V hacminin belirli bölgesinde ω açısal frekanslı her bir kipteki enerji, her birinin enerjisi $\hbar\omega$ olan fotonların sayısı $N(\omega)$ ile belirlenir. Bir kipteki toplam enerji $N(\omega)\hbar\omega$ ile verilir ve enerji yoğunluğu $N(\omega)\hbar\omega/V$ dir.

Klasik yaklaşımla kuantumsal yaklaşım arasında bağlantı kurmak için önce alanın

$$\frac{1}{2}(\varepsilon_0\vec{E}^2 + \vec{B}^2 / \mu_0) = 4\varepsilon_0\omega^2 A_0^2(\omega)\sin^2(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t + \delta_\omega) \quad (2.1.8)$$

ile verilen enerji yoğunluğu oluşturulur. ε_0 ve μ_0 sırasıyla serbest uzayın elektrik ve manyetik geçirgenlikleri olmak üzere periyod $2\pi/\omega$ üzerinden enerji yoğunluğu ortalaması,

$$\rho(\omega) = 2\varepsilon_0\omega^2 A_0^2(\omega) \quad (2.1.9)$$

dir. Bu sonucu $N(\omega)\hbar\omega/V$ ye eşitleyerek

$$A_0^2(\omega) = \frac{\hbar}{2\varepsilon_0\omega V} N(\omega) \quad (2.1.10)$$

elde edilir. Poynting vektörü $(\vec{E} \times \vec{B})/\mu_0$ 'nın büyüklüğü \vec{k} yayılma vektörünün doğrultusunda dik birim alandan geçen enerji akışı hızıdır. Bir periyot üzerinden ortalama alındığında bu büyüklük

$$\begin{aligned} I(\omega) &= 2\varepsilon_0\omega^2 c A_0^2(\omega) \\ &= \left[\frac{N(\omega)\hbar\omega}{V} \right] c \\ &= \rho(\omega)c \end{aligned} \quad (2.1.11)$$

olur ve ışınımın yoğunluğunu tanımlar. Işınımın genel bir atması, $\Phi = 0$ alınarak ve $\vec{A}(\vec{r}, t)$ 'yi $\vec{A}(\omega, \vec{r}, t)$ düzlem dalgalarının üst üste gelmiş biçiminde göstererek tanımlanabilir.

Her bir düzlem dalga bileşeni için yayılma doğrultusu \vec{k} ve çizgisel kutuplanma için $\hat{\epsilon}$ doğrultusu alınır. Yani,

$$\vec{A}_0(\omega) = A_0(\omega)\hat{\epsilon} \quad (2.1.12)$$

şeklinde seçerek

$$\vec{A}(\vec{r}, t) = \int_{\Delta\omega} A_0(\omega)\hat{\epsilon} \left[\exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t + \delta\omega)] + k.e \right] d\omega \quad (2.1.13)$$

yazılabilir. $A_0(\omega)$ genliğinin, $\Delta\omega$ genişliğindeki bölgede sıfırdan farklı ω_0 açısal frekansı civarında maksimumu olduğu varsayılır. Doğal olarak oluşan bir atma, ışınım birbirinden bağımsız olarak foton yayan birçok atomdan doğmaktadır. Bu durumda, δ_ω fazlarının ω nın fonksiyonu olarak gelişi güzel dağıldığını, yani ışınımın uyumcul olmadığını ima eder. (Bu ifade yüksek ölçüde uyumcul olan lazer ışınımına uygulanmaz). Denklem (2.1.13) te bir atmadaki ortalama enerji yoğunluğu,

$$\bar{\rho} = \int_{\Delta\omega} 2\varepsilon_0\omega^2 A_0^2(\omega)d\omega = \int_{\Delta\omega} \rho(\omega)d\omega \quad (2.1.14)$$

olarak bulunur. Denklem (2.1.9) ile karşılaştırıldığında her bir kipten gelen katkılar toplanır; girişim terimleri yok olup benzer biçimde ortalama şiddet;

$$I = \int_{\Delta\omega} I(\omega)d\omega \quad (2.1.15)$$

dir ve burada $I(\omega)$ birim açısal frekans bölgesi başına şiddeti verir.

2.2 ELEKTROMANYETİK ALANDA YÜKLÜ PARÇACIKLAR

Elektromanyetik alanda yükü q ve kütlesi m olan spinsiz bir parçacığın Hamiltonyeni,

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - q\vec{A})^2 + q\phi \quad (2.2.1)$$

ile verilir. Burada \vec{p} parçacığın momentumudur. Spine bağlı küçük terimler ihmal edilerek elektromanyetik alanda m kütleli bir elektronun hamiltonyeni için $q=-e$ alınır. Elektromanyetik alandaki hidrojen tipi bir atomu tanımlamak için Ze yüklü M kütleli

çekirdeğin varlığı hesaba katılır. M kütlesi elektronun m kütlesi yanında çok büyük olduğu için (burada $H, He^+ \dots$ gibi bir elektronlu “basit” sistemler alınır) ışınım alanı ile çekirdek alanı arasındaki etkileşme büyük bir yaklaşıklıkla ihmal edilebilir. Aynı şekilde indirgenmiş kütle etkileri ihmal edilebilir ve çekirdek koordinat sisteminin merkezinde olup hamiltonyene, elektron ile çekirdek arasındaki $-\frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r}$ elektrostatik Coulomb potansiyeli eklenir.

Elektromanyetik alanda hidrojen tipi bir atom için zamana bağlı Schrödinger denklemi;

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[\frac{1}{2m} (-i\hbar \vec{\nabla} + e\vec{A})^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r} \right] \Psi(\vec{r}, t) \quad (2.2.2)$$

dir. Burada $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ olarak yazılır. Denklem (2.1.3) koşulundan dolayı

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot (\vec{A}\Psi) &= \vec{A} \cdot (\vec{\nabla}\Psi) + (\vec{\nabla} \cdot \vec{A})\Psi \\ &= \vec{A} \cdot (\vec{\nabla}\Psi) \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

dir. $\vec{\nabla}$ ve \vec{A} sıra değiştirmektedir. Bu denklem (2.2.2)'de kullanılırsa;

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r} - \frac{i\hbar e}{m} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} + \frac{e^2}{2m} \vec{A}^2 \right] \Psi(\vec{r}, t) \quad (2.2.4)$$

elde edilir.

\vec{A} 'ya göre çizgisel olan terimle karşılaştırıldığında \vec{A}^2 'li terimin küçük olduğu, zayıf alan hali incelenir. Buna göre, \vec{A}^2 'li terim sıfır alınır ve çizgisel terime küçük bir tedirginme olarak bakılır. Fotonlara göre bu, belli bir zamanda yalnızca bir fotonun yayınlandığı yada soğurduğu anlamına gelmektedir. İki fotonun aynı anda yayınlanması veya soğurulması, genel olarak ihmal edilir.

2.3 GEÇİŞ ORANI VE ATOMİK SÜREÇLER

\vec{A}^2 'li terim ihmal edilerek denklem (2.2.4)'te yazılan zamana bağlı Schrödinger denklemi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = [H_0 + H'(t)]\Psi \quad (2.3.1)$$

olarak yazılır. Buradaki

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 - \frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r} \quad (2.3.2)$$

dış alan yokken bir elektronlu atomu tanımlayan zamana bağlı hidrojen tipi Hamiltonyendir ve

$$H'(t) = -\frac{i\hbar e}{m} \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \quad (2.3.3)$$

ise zamana bağlı tedirginmedir. Tedirginme olmamış

$$H_0 \Psi_k = E_k \Psi_k \quad (2.3.4)$$

denklemin Ψ_k özfonksiyonları boylandırılmış hidrojen tipi dalga fonksiyonlarıdır. Ψ_k özfonksiyonları için zamana bağlı Schrödinger denkleminin denklem (2.3.1)'in boylandırılmış olduğu varsayılan genel çözümü

$$\Psi = \sum_k c_k(t) \Psi_k(\vec{r}) e^{-iE_k t / \hbar} \quad (2.3.5)$$

olarak açılabilir. Buradaki toplama hidrojen tipi Ψ_k , özfonksiyonları üzerinden hem kesikli hem de sürekli. c_k katsayıları $\lambda=1$ için

$$\dot{c}_b(t) = (i\hbar)^{-1} \sum_k H'_{bk}(t) c_k(t) e^{i\omega_{bk} t} \quad (2.3.6)$$

biçimindeki $\int \Psi_k^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) d\vec{r} = \delta(k - k')$ denklemlerini sağlar. Burada

$$\begin{aligned}
H'_{bk}(t) &= \langle \Psi_b | H'(t) | \Psi_k \rangle \\
&= \int \Psi_b^*(\vec{r}) H' \Psi_k(\vec{r}) d\vec{r}
\end{aligned} \tag{2.3.7}$$

ve

$$\omega_{bk} = (E_b - E_k) / \hbar \tag{2.3.8}$$

dir. Ψ_a dalga fonksiyonu ile tanımlanan E_a enerjisinin kararlı, bağlı durumda bulunduğu ve ışınım atmasının $t=0$ da olduğu varsayılır. Böylece

$$c_k(t \leq 0) = \delta_{ka} \tag{2.3.9}$$

olarak verilir ve H' tedirginmesi ile birinci mertebeden denklem

$$\begin{aligned}
c_b^{(1)}(t) &= (i\hbar)^{-1} \int_0^t H'_{ba}(t') e^{i\omega_{ba}t'} dt' \\
&= -\frac{e}{m} \int_0^t \langle \Psi_b | \vec{A} \cdot \vec{\nabla} | \Psi_a \rangle e^{i\omega_{ba}t'} dt'
\end{aligned} \tag{2.3.10}$$

şeklinde elde edilir. Burada $\omega_{ab}(E_b - E_a) / \hbar$ ve

$$\langle \Psi_b | \vec{A} \cdot \vec{\nabla} | \Psi_a \rangle = \int \Psi_b^*(\vec{r}) \vec{A} \cdot \vec{\nabla} \Psi_a(\vec{r}) d\vec{r} \tag{2.3.11}$$

dir. Bundan sonra

$$\begin{aligned}
c_b^{(1)}(t) &= -\frac{e}{m} \int_{\Delta\omega} d\omega \vec{A}_0(\omega) \left[e^{i\delta_{\omega'}} \langle \Psi_b | e^{ik \cdot \vec{r}} \hat{\varepsilon} \cdot \vec{\nabla} | \Psi_a \rangle \int_0^t dt' e^{i(\omega_{ba} - \omega)t'} \right. \\
&\quad \left. + e^{i\delta_{\omega'}} \langle \Psi_b | e^{-ik \cdot \vec{r}} \hat{\varepsilon} \cdot \vec{\nabla} | \Psi_a \rangle \int_0^t dt' e^{i(\omega_{ba} - \omega)t'} \right]
\end{aligned} \tag{2.3.12}$$

elde etmek için denklem (2.1.13)'te verilen $\vec{A}(\vec{r}, t)$ vektör potansiyeli kullanılır. Atma süresi $2\pi / \omega_{ba}$ periyodik zamanından çok büyük olur. Denklem (2.3.12)'de t' üzerindeki ilk integral $\omega_{ba} \cong \omega$ yani $E_b \cong E_a + \hbar\omega$ olmadıkça ihmal edilebilecektir. Böylece atomun son

durumunun ilk durumdakinden daha büyük enerjiye sahip olduğu ve ışıınımdan $\hbar\omega$ enerjili bir fotonun soğurulduğu görülür. Öte yandan, denklem (2.3.12)'de t' üzerindeki ikinci integral $\omega_{ba} \cong -\omega$, yani $E_b \cong E_a - \hbar\omega$ olmadıkça ihmal edilebilecektir. Bu halde atomun ilk durumu son durumundan daha büyük enerjiye sahiptir ve $\hbar\omega$ enerjili bir foton yayınlar. a ve b durum çifti için bu koşullardan yalnızca biri sağlandığından iki terim ayrı alınır.

2.3.1 SOĞURMA

Işınımin uyumlu olduğu teriminin oluşmadığı gerçeği kullanılarak t anında sistemin b durumunda bulunma olasılığı

$$|c_b^{(1)}(t)|^2 = 2 \int_{\Delta\omega} d\omega \left[\frac{eA_0(\omega)}{m} \right]^2 |M_{ba}(\omega)|^2 F(t, \omega - \omega_{ba}) \quad (2.3.13)$$

şeklindedir. Burada M_{ba} matris elemanları

$$\begin{aligned} M_{ab} &= \langle \Psi_b | e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{\epsilon} \cdot \vec{\nabla} | \Psi_a \rangle \\ &= \int \Psi_b^*(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{\epsilon} \cdot \vec{\nabla} \Psi_a(\vec{r}) d\vec{r} \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

olarak tanımlanır ve $\omega = kc$ dir. Bu denklemde $\tilde{\omega} = \omega - \omega_{ba}$ yazıldığı zaman denklem (2.3.13) deki $F(t, \tilde{\omega})$ fonksiyonu

$$F(t, \tilde{\omega}) = \frac{1 - \cos \tilde{\omega}t}{\tilde{\omega}^2} \quad \tilde{\omega} = \omega - \omega_{ba} \quad (2.3.15)$$

olmaktadır. $\omega \rightarrow \tilde{\omega}$ olarak yerleştirilmektedir. $F(t, \tilde{\omega})$ fonksiyonunda $\tilde{\omega} = 0$ da $\omega = \omega_{ba}$ alınır ayrıca $A_0^2(\omega)$ ve $|M_{ba}(\omega)|^2$ değişen büyüklükler integral dışında yazılır ve ω integrasyonunun sınırları $\pm\infty$ a genişletilebilir. Böylece

$$|c_b^{(1)}(t)|^2 = 2 \left[\frac{eA_0(\omega_{ba})}{m} \right]^2 |M_{ba}(\omega_{ba})|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} F(t, \omega) d\omega \quad (2.3.16)$$

olur. Buradaki $\int_{-\infty}^{+\infty} F(t, \omega) d\omega = t \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi t$ sonucu kullanılırsa denklem aşağıdaki şekilde

$$|c_b^{(1)}(t)|^2 = 2\pi \left[\frac{eA_0(\omega_{ba})}{m} \right]^2 |M_{ba}(\omega_{ba})|^2 t \quad (2.3.17)$$

elde edilir. $|c_b^{(1)}(t)|^2$ olasılığı zamanla doğrusal olarak artar ve soğurma için W_{ba} geçiş hızı,

$$W_{ba} = \frac{d}{dt} |c_b^{(1)}(t)|^2 = 2\pi \left[\frac{eA_0(\omega_{ba})}{m} \right]^2 |M_{ba}(\omega_{ba})|^2 \quad (2.3.18)$$

olarak tanımlanır. Denklem (2.1.11)'deki $I(\omega)$, birim açısal frekans bölgesi başına şiddet cinsinden yazılırsa

$$W_{ba} = \frac{4\pi^2}{m^2 c} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{I(\omega_{ba})}{\omega_{ba}^2} |M_{ba}(\omega_{ba})|^2 \quad (2.3.19)$$

elde edilir. Atom başına, demetten enerji soğurma hızı, $(\hbar\omega_{ba})W_{ba}$ dır. $I(\omega_{ba})$ ile bölünen ve (atom başına) enerji soğurma hızı olan bir soğurma tesir kesiti σ_{ab} olur. Yani,

$$\sigma_{ba} = \frac{4\pi^2 \alpha \hbar^2}{m^2 \omega_{ba}} |M_{ba}(\omega_{ba})|^2 \quad (2.3.20)$$

dır. Burada $\alpha = (e^2 / 4\pi\epsilon_0) / \hbar c \cong 1/137$ ince yapı sabitidir. σ_{ba} tesir kesiti, alan boyutuna sahiptir ve göz önüne alınan atomda, saniyede her birinin enerjisi $(\hbar\omega_{ba})$ olan fotonlardan aynı sayıda foton soğurabilen, demete dik olarak yerleştirilmiş soğurucu madde diskinin alanıdır.

2.3.2 UYARILMIŞ YAYINLAMA

Uyarılmış yayınlamada geçiş hızını hesaplamak için denklem (2.3.12)'deki $\hbar\omega$ enerjisinin foton yayınladığında aşağı doğru $E_b \simeq E_a - \hbar\omega$ geçişine karşılık gelen $c_b^{(1)}(t)$ ifadesindeki ikinci terime bakılır. Uyarılmış yayınlamaya karşılık $b \rightarrow a$ geçişine bakılır,

$a \rightarrow b$ ise ele alınan soğurma sürecinin tersi olarak değerlendirilir. Uyarılmış yayma için W_{ba} geçiş hızı,

$$\bar{W}_{ab} = \frac{4\pi^2}{m^2 c} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{I(\epsilon_{ba})}{\omega_{ba}^2} |M_{ab}(\omega_{ba})|^2 \quad (2.3.21)$$

şeklindedir. Burada

$$\begin{aligned} \bar{M}_{ab} &= \langle \Psi_a | e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{\epsilon} \cdot \vec{\nabla} | \Psi_b \rangle \\ &= \int \Psi_a^*(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{\epsilon} \cdot \vec{\nabla} \Psi_b(\vec{r}) d\vec{r} \end{aligned} \quad (2.3.22)$$

dir. Kısmi integral yapılır ve $\hat{\epsilon} \cdot \vec{k} = 0$ şeklinde alınırsa

$$\bar{M}_{ab} = -M_{ba}^* \quad (2.3.23)$$

elde edilir. Denklem (2.3.19) ve (2.3.21) karşılaştırıldığında

$$\bar{W}_{ab} = W_{ba} \quad (2.3.24)$$

olur. Böylece aynı ışınım alanı altında atomun a durumundan b durumuna uyarılmasında, birim zamandaki geçişlerin sayısının, aynı ışınım altında b durumundan a durumuna dönenlerin sayısı ile aynı olduğu görülür.

Kuantum elektrodinamiğinde vektör potansiyelinin bir N foton durumundan tek bir fotonun soğurulmasını ifade eden kısım,

$$\vec{A}_1 = \hat{\epsilon} \left[\frac{N(\omega)\hbar}{2V\epsilon_0\omega} \right]^{1/2} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t + \delta\omega)} \quad (2.3.25)$$

biçimine sahiptir. Kuantum elektrodinamiğinde soğurma geçiş hızının birinci mertebe tedirginme kuramına göre,

$$W_{ba} = \frac{4\pi^2}{m^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{N(\omega_{ba})\hbar}{V\omega_{ba}} |M_{ba}|^2 \delta(\omega - \omega_{ba}) \quad (2.3.26)$$

ile verildiği gösterilebilir. Denklem (2.1.11) kullanılır ve ω_{ba} civarındaki açısal frekans cinsinden integrali alınır, bu sonucun denklem (2.3.19) ile aynı olduğu görülür. Buna karşılık vektör potansiyelinin N foton durumuna tek bir fotonu ekleyerek bir fotonun yaratılışını tanımlayan kısmı ise,

$$\bar{A}_2 = \hat{\epsilon} \left[\frac{(N(\omega)+1)\hbar}{2V\epsilon_0\omega} \right]^{1/2} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t+\delta\omega)} \quad (2.3.27)$$

dır ve yayınlama için geçiş oranı,

$$\bar{W}_{ab} = \frac{4\pi^2}{m^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{[(N(\omega_{ba})+1)\hbar]}{V\omega_{ba}} |M_{ba}|^2 \delta(\omega - \omega_{ba}) \quad (2.3.28)$$

ile verilir. ω üzerinden integral alındıktan sonra bu ifadenin $N(\omega_{ba})+1$ yerine $N(\omega_{ba})$ yerleştirilmesi koşulu ile yarı klasik ifade (yani denklem (2.3.21)) ile özdeş olacağı görülür. Yarı-klasik yaklaşıklık $N(\omega_{ba})$ yanında 1'in ihmal edilebileceğini ortaya koyar. Dış alan yokken $N=0$ değerine sahiptir ve bir fotonun kendiliğinden yayınlaması için geçiş hızı, W_{ab}^s , denklem (2.3.28)'den yararlanılırsa

$$W_{ab}^s = \frac{4\pi^2}{m^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{\hbar}{V\omega_{ba}} |M_{ba}|^2 \delta(\omega - \omega_{ba}) \quad (2.3.29)$$

ile verilir. Gözlenebilen, $d\Omega$ katı açı elemanı içinden (θ, ϕ) doğrultusunda bir fotonun yayınlamasıdır. Bu yüzden, fiziksel geçiş oranını elde etmek için bu aralıktaki izinli foton durumları sayısı üzerinden denklem (2.3.29) toplanır. Bunu yapabilmek için, $W_{ba} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{ba}|^2 \rho_b(E)$ ile verilen birinci mertebeye tedirginme kuramına göre son foton durumlarının $\rho_a(\omega)$ yoğunluğu hesaplanır.

Durum yoğunluğunu hesaplamak için; kenar uzunluğu L ve hacmi V olan bir küp olsun. (V'nin büyük olması koşulu ile biçimi önemli değildir). Periyodik sınır koşulları yayınlanan fotonun dalga fonksiyonunu gösteren denklem (2.3.27) ifadesinde $\exp(-i\vec{k}\cdot\vec{r})$ fonksiyonuna yüklenilebilir. Yani,

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z \quad (2.3.30)$$

olur ve burada n_x, n_y, n_z pozitif veya negatif tam sayılardır, ya da sıfırdırlar. L çok büyük olduğu için n_x, n_y, n_z ' ye sürekli değişkenler olarak bakılmaktadır ve $dk = dk_x dk_y dk_z$ bölgesindeki durumların sayısı

$$\begin{aligned} dn_x dn_y dn_z &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 dk_x dk_y dk_z \\ &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2 dk d\Omega \end{aligned} \quad (2.3.31)$$

olarak yazılabilir. $V = L^3$ ve $\omega = ck$ cinsinden ifade edildiğinde $d\Omega$ içindeki yayılma doğrultuları ile $d\omega$ açısal frekans aralığındaki durumların sayısı

$$\rho_a(\omega) d\omega d\Omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\omega^2}{c^3} d\omega d\Omega \quad (2.3.32)$$

olur. Denklem (2.3.29) kullanılırsa ve ω açısal frekansı üzerinden integral alınırsa $d\Omega$ katı açısı içinde bir fotonun yayınlanması için geçiş hızı,

$$W_{ab}^s(\Omega) d\Omega = \frac{\hbar}{2\pi m^2 c^3} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right) \omega_{ba} |M_{ba}(\omega_{ba})|^2 d\Omega \quad (2.3.33)$$

bulunur. Toplam geçiş oranı, ϵ_λ ($\lambda = 1, 2$) kutuplanma vektörlerine karşılık gelen fotonun iki bağımsız kutuplanmasının her biri üzerinde toplam alınarak ve yayınlamanın tüm açıları üzerinde integral alınarak bulunur. Yani,

$$W_{ab}^s = \frac{\hbar}{2\pi m^2 c^3} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right) \int d\Omega \sum_{\lambda=1}^2 \omega_{ba} |M_{ba}^\lambda(\omega_{ba})|^2 \quad (2.3.34)$$

dir. Buradaki M_{ba}^λ , (2.3.14)'de $\hat{\epsilon}$ yerine $\hat{\epsilon}_\lambda$ ile değiştirilerek elde edilir.

2.3.3 İYONLAŞMA

Yeterince yüksek frekanslı elektromanyetik ışınım bir A atomik sistemi tarafından soğurulursa bu sistemin son durumu sürekli bölgede yer alabilir ve bir yada birkaç elektron A'dan atılabilir. Bu olay, fotoiyonlaşma olarak bilinir. Bu kısımda, elektronun hidrojen tipi bir atomdan (iyondan) çıkarıldığı belirli tek bir fotoiyonlaşma süreci için tesir kesiti elde edilecektir. Bu atomun (iyonun) başlangıçta $\Psi_a(\vec{r}) \equiv \Psi_{1s}(\vec{r})$ dalga fonksiyonu ile tanımlanan ve E_{1s} enerjisine sahip olan (1s) taban durumunda olduğu varsayılır. Soğurulan fotonun enerjisi $E = h\nu = \hbar\omega$ ile gösterilir. Elektronun son durumundaki dalga vektörü \vec{k}_f ve momentumu $\vec{p}_f = \hbar\vec{k}_f$ olur. Atılan elektronun göreliliği varsayılırsa, son durumdaki kinetik enerjisi $\hbar^2 k_f^2 / 2m$ olup enerjinin korunumu,

$$\hbar\omega + E_{1s} = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} \quad (2.3.35)$$

ile verilir. Bu bağıntı,

$$\hbar\omega (\text{veya } \hbar^2 k_f^2 / 2m) \ll mc^2 \quad (2.3.36)$$

olduğu için göreliliği olmayan bölgede geçerlidir. $\Psi_b(\vec{k}_f, \vec{r})$ son durumu, dalga vektörü \vec{k}_f ve Ze yüklü çekirdeğin alanında hareket eden, bir $\hbar^2 k_f^2 / 2m$ enerjisine sahip bir elektrona karşılık gelen sürekli durumu gösterir. Böylece $\Psi_b(\vec{k}_f, \vec{r})$,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze}{(4\pi\epsilon_0)r} - \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} \right) \Psi_b(\vec{k}_f, \vec{r}) = 0 \quad (2.3.37)$$

denklemini sağlayan (pozitif enerjili) bir Coulomb dalga fonksiyonudur. Atılan elektronun yeterince yüksek enerjileri için (yani $\hbar^2 k_f^2 / 2m \gg |E_{1s}|$ iken) çekirdekle etkileşme ihmal edilir ve $\Psi_b(\vec{k}_f, \vec{r})$,

$$\Psi_b(\vec{k}_f, \vec{r}) = V^{-1/2} e^{i\vec{k}_f \cdot \vec{r}} \quad (2.3.38)$$

ile gösterilebilir. Fotoelektrik tesir kesiti, atılan elektronun sürekli durumları üzerinden toplanarak denklem (2.3.20)'den elde edilebilir. Buna göre,

$$\sigma = \frac{4\pi^2 \alpha \hbar^2}{m^2 \omega_{ba}} \tilde{\rho}_b \int |M_{ba}(\omega_{ba})|^2 d\Omega \quad (2.3.39)$$

bulunur. Burada $\Omega = (\theta, \phi)$, atılan elektronun açısal koordinatlarını gösterir. Burada $\tilde{\rho}_b = (2\pi)^{-3} V m k_f \hbar^{-1}$ son durumların yoğunluğudur. (θ, ϕ) doğrultusunda $d\Omega$ katı açısı içinden fırlatılacak bir elektron için diferansiyel tesir kesiti,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (2\pi)^{-3} \frac{4\pi^2 \hbar \alpha}{m} \left(\frac{k_f}{\omega} \right) |V^{1/2} M_{ba}(\omega)|^2 \quad (2.3.40)$$

olur. Denklem (2.3.14) ve denklem (2.3.38) kullanılarak bulunan M_{ba} matris elemanı,

$$M_{ba} = V^{-1/2} \int e^{-i\vec{k}_f \cdot \vec{r}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{\varepsilon} \cdot \vec{\nabla} \Psi_{1s}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.3.41)$$

ile verilir. Kısmi integral alınımıyla,

$$V^{1/2} M_{ba} = -i \hat{\varepsilon} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_f) \int e^{i(\vec{k} - \vec{k}_f) \cdot \vec{r}} \Psi_{1s}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.3.42)$$

olarak bulunmaktadır. $\vec{k} \cdot \hat{\varepsilon} = 0$ olduğu için

$$\hat{\varepsilon} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_f) = -k_f \cos \gamma \quad (2.3.43)$$

olur. Burada γ elektronun atılma doğrultusu ile kutuplanma doğrultusu arasındaki açıdır. Denklem (2.3.42)'de görünen integral $\Psi_{1s}(\vec{r})$ taban durumu dalga fonksiyonunun Fourier dönüşümü ile orantılıdır. Yani,

$$\int e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \Psi_{1s}(\vec{r}) d\vec{r} = 8\pi \left(\frac{Z^3}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} \frac{Z/a_0}{[(Z/a_0)^2 + \vec{K}^2]^2} \quad (2.3.44)$$

dir. Burada

$$\vec{K} = \vec{k} - \vec{k}_f \quad (2.3.45)$$

vektörü kullanılmaktadır. Denklem (2.3.40), denklem (2.3.42) ve denklem (2.3.45)'te diferansiyel tesir kesiti,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 32\alpha \left(\frac{\hbar}{m} \right) \left(\frac{k_f^3}{\omega} \right) \frac{Z^5 a_0^3 \cos^2 \gamma}{[Z^2 + K^2 a_0^2]^4} \quad (2.3.46)$$

olur. Işınımın \vec{k} vektörünün yayılma doğrultusu x eksenini boyunca ve $\hat{\epsilon}$ kutuplanma vektörünün doğrultusu ise, y eksenini boyunca alınır. Böylece $\vec{k}_f, \Omega \equiv (\theta, \phi)$ doğrultusunda olduğundan,

$$\cos \gamma = \sin \theta \cos \phi \quad (2.3.47)$$

ve

$$K^2 = k^2 - k_f^2 - 2kk_f \cos \theta \quad (2.3.48)$$

şeklindedir. Gelen fotonun enerjisi iyonlaşma eşik enerjisinden (atomik hidrojen için $\sim 13,6$ eV) büyük olursa yani $\hbar\omega \gg |E_{1s}|$ ise denklem (2.3.35)'ten

$$\hbar\omega \cong \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} \quad (2.3.49)$$

elde edilir ve bunun sonucu olarak,

$$\frac{k}{k_f} \cong \frac{\hbar k_f}{2mc} = \frac{v_f}{2c} \quad (2.3.50)$$

elde edilir. Burada v_f atılan elektronun hızıdır. $v_f/c \ll 1$ olduğu göreceli bölgede bu sonucu,

$$K^2 \cong k_f^2 \left(1 - \frac{v_f}{c} \cos \theta \right) \quad (2.3.51)$$

şeklinde bulunur. Atılan elektronun momentumu $\hbar k_f$ 'dir. Bundan başka

$\hbar\omega \cong \hbar^2 k_f^2 / 2m \gg |E_{1s}|$ ve $E_{1s} = -Z^2 \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) / 2a_0$ olduğu için,

$$k_f^2 a_0^2 \gg \frac{2m}{\hbar^2} |E_{1s}| a_0^2 = Z^2 \quad (2.3.52)$$

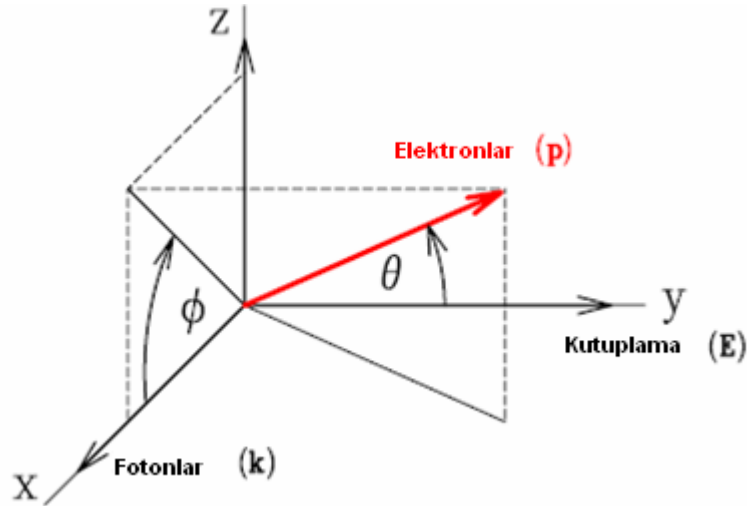
olur ve bunun sonucunda

$$Z^2 + K^2 a_0^2 = k_f^2 a_0^2 \left(1 - \frac{v_f}{c} \cos \theta \right) \quad (2.3.53)$$

elde edilir. Diferansiyel tesir kesiti de

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 32\alpha \left(\frac{\hbar}{m} \right) \frac{Z^5}{\omega (k_f a_0)^5} \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \phi}{\left(1 - \frac{v_f}{c} \cos \theta \right)^4} \quad (2.3.54)$$

olur.



Şekil 2.3.1 θ ve ϕ açıları geometrik olarak tanımlanır. θ açısı \mathbf{p} momentum vektörü ile \mathbf{E} kutuplanma vektörü arasındadır. ϕ açısı ise, \vec{k} yayılma vektörü ve \mathbf{p} içindeki $x-z$ düzleminin izdüşümü arasında yer almaktadır [5].

Atılan elektronların, gelen ışınının ε kutuplanma vektörüne göre, bir \cos^2 dağılımına sahip olduğu belirtilir. Kutuplanmamış foton demeti için ortalama, fotonun kutuplanmaları üzerinde alınmalıdır ve bu durumda

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{kutuplanmamış}} = 16\alpha\left(\frac{\hbar}{m}\right)\frac{Z^5}{\omega(k_f a_0)^5}\frac{\sin^2\theta}{\left(1-\frac{v_f}{c}\cos\theta\right)^4} \quad (2.3.55)$$

elde edilir. Denklem (2.3.54) ve denklem (2.3.55) tesir kesitlerinin ikisi de, gelen foton demetine dik açılarda elektronların atılmasını yeğleyen θ açıları için bir \sin^2 dağılımı gösterir. $\left(1-\frac{v_f}{c}\cos\theta\right)^{-4}$ niceliği açısal dağılımı da etkiler fakat $v_f \ll c$ olduğundan bu yalnız $\sin^2\theta$ dağılımına küçük bir düzeltme verir. Böylece,

$$\left(1-\frac{v_f}{c}\cos\theta\right)^{-4} = 1 + 4\frac{v_f}{c}\cos\theta + \dots \quad (2.3.56)$$

olduğu için $(v_f/c)^2$ mertebeli terimler atılır ve denklem (2.3.55) diferansiyel tesir kesiti,

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{kutuplanmamış}} = 16\alpha\left(\frac{\hbar}{m}\right)\frac{Z^5}{\omega(k_f a_0)^5}\sin^2\theta\left(1+4\frac{v_f}{c}\cos\theta\right) \quad (2.3.57)$$

şeklinde yazılabilir. Atılan elektronun (θ, ϕ) açıları üzerinden integralinin alınmasıyla gelen kutuplanmış foton demeti için toplam tesir-kesiti,

$$\sigma = \frac{128\pi}{3}\alpha\left(\frac{\hbar}{m}\right)\frac{Z^5}{\omega(\vec{k}_f a_0)^5} \quad (2.3.58)$$

ile verilir. Denklem (2.3.49) ve $E_{1s} = -Z^2\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)/2a_0 = -\left(\frac{1}{2}\right)mc^2(Z\alpha)^2$ olduğunu kullanarak, denklem (2.3.58)'i,

$$\sigma = \frac{256\pi}{3}\alpha Z^{-2}\left(\frac{|E_{1s}|^{7/2}}{\hbar\omega}\right)a_0^2 \quad (2.3.59)$$

veya

$$\sigma = \frac{16\sqrt{2\pi}}{3} \alpha^8 Z^5 \left[\frac{mc^2}{\hbar\omega} \right]^{7/2} a_0^2 \quad (2.3.60)$$

olarak yazılabilir. Denklem (2.3.60)'tan fotoelektrik tesir kesiti σ 'nın foton enerjisi artarken $(\hbar\omega)^{-7/2}$ ile azaldığı ve çekirdek yükü artarken Z^5 ile arttığı görülür. Bu bağıntı sadece bir elektronlu atomlar ve iyonların iyonlaşma potansiyellerine değil aynı zamanda, dipol yaklaşıklığında foton enerjisi artmasına rağmen X-ışınları ile atomların iç kabuklarından elektronların atılmasına da uygulanabilir.

2.3.3.1 DİPOL YAKLAŞIKLIĞINDA İYONLAŞMA ORANI

Dipol yaklaşıklığı için denklem (2.3.14) ile tanımlanan M_{ba} matris elemanları birçok uygulamada $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$,

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = 1 + (i\vec{k} \cdot \vec{r}) + \frac{1}{2!} (i\vec{k} \cdot \vec{r})^2 + \dots \quad (2.3.61)$$

şeklinde Taylor serisine açılarak basitleştirilebilir. Buna optiksel geçişler örnek olarak verilebilir. Atomik dalga fonksiyonları, atomun ilk Bohr yarıçapı $1A^0 (=10^{-8} \text{ cm})$ mertebesindedir. Optiksel geçişlere eşlik eden dalga boyları birkaç bin Angström mertebesindedir ve buna karşılık gelen dalga sayısı $k = 2\pi/\lambda$, 10^5 cm^{-1} mertebesindedir. Böylece (kr) niceliği, $r < 1A^0$ olmasından ötürü küçüktür ve bu yaklaşımla denklem (2.3.14)'teki $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \cong 1$ olarak alınır, bu da elektrik dipol yaklaşıklığı olarak bilinir. (Işınımın frekansı arttıkça dipol yaklaşıklığının doğruluğu azalır ve x-ışını geçişleri için uygunluğunu kaybeder.) Böylece,

$$\begin{aligned} M_{ba} &= \hat{\varepsilon} \cdot \langle \Psi_b | \vec{\nabla} | \Psi_a \rangle \\ &= \hat{\varepsilon} \cdot \frac{i}{\hbar} \langle \Psi_b | \vec{p} | \Psi_a \rangle \\ &= \hat{\varepsilon} \cdot \frac{im}{\hbar} \langle \Psi_b | \vec{r} | \Psi_a \rangle \end{aligned} \quad (2.3.62)$$

olur. Çünkü $\vec{p} = m\vec{r} = -i\hbar\vec{\nabla}$ dir. Dinamik r değişkenine $\frac{d\vec{A}}{dt} = \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\vec{A}, H]$ Heisenberg hareket denklemi uygulanır ve burada $\frac{d\vec{A}}{dt}$ matris elemanları \vec{A} nın matris elemanlarının zamana göre değişme hızı olan işlemcidir. Bu denklem dinamik bir değişkenin Heisenberg hareket denklemi olarak bilinir ve

$$\vec{r} = (i\hbar)^{-1}[\vec{r}, H_0] \quad (2.3.63)$$

şeklinde elde edilir. Burada, tedirginme kuramından dolayı H yerine H_0 yerleştirilir. Böylece,

$$\begin{aligned} \langle \Psi_b | \vec{r} | \Psi_a \rangle &= (i\hbar)^{-1} \langle \Psi_b | \vec{r}H_0 - H_0\vec{r} | \Psi_a \rangle \\ &= (i\hbar)^{-1}(E_a - E_b) \langle \Psi_b | \vec{r} | \Psi_a \rangle \end{aligned} \quad (2.3.64)$$

veya daha kısa olarak gösterilirse

$$\vec{p}_{ba} = im\omega_{ba}\vec{r}_{ba} \quad (2.3.65)$$

şeklinde yazılır. Burada

$$\vec{p}_{ba} = \langle \Psi_b | \vec{p} | \Psi_a \rangle = m \langle \Psi_b | \vec{r} | \Psi_a \rangle \quad (2.3.66)$$

ve

$$\vec{r}_{ba} = \langle \Psi_b | \vec{r} | \Psi_a \rangle \quad (2.3.67)$$

olur. Böylece M_{ba} ,

$$M_{ba} = -\frac{m\omega_{ba}}{\hbar} \hat{\epsilon} \cdot \vec{r}_{ba} \quad (2.3.68)$$

biçiminde ifade edilir. Burada (2.3.20) denklemindeki tesir kesiti,

$$\sigma = \frac{4\pi^2\alpha\hbar^2}{m^2\omega} |M_{ba}(\omega_{ba})|^2 \quad (2.3.69)$$

kullanılır. Buradaki $\alpha = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{\hbar c}$ ince yapı sabitidir. Denklem (2.3.69) açık bir şekilde yazılırsa,

$$\sigma = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{m^2 \omega} \frac{1}{\hbar c} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) |M_{ba}(\omega_{ba})|^2 \quad (2.3.70)$$

olur. Elektrik dipol yaklaşıklığındaki fotoelektrik için tesir kesiti, denklem (2.3.68) denklem (2.3.69)'a yerleştirilerek elde edilir. Yani,

$$\sigma = \frac{4\pi^2 \omega}{\hbar c} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) |\hat{\epsilon} \cdot r_{ba}|^2 \quad (2.3.71)$$

şeklinde olur. Böylece, elektrik dipol momenti

$$\vec{D} = -e\vec{r} \quad (2.3.72)$$

ve onun matris elemanını yazmak uygun olmaktadır

$$\vec{D}_{ba} = -e\vec{r}_{ba} \quad (2.3.73)$$

Buna göre denklem (2.3.71)

$$\sigma = \frac{4\pi^2 \omega}{\hbar c} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) |\hat{\epsilon} \cdot \vec{D}_{ba}|^2 \quad (2.3.74)$$

olur. $\hat{\epsilon} \cdot \vec{D}_{ba}$ niceliği b ile a durumları arasında $\hat{\epsilon}$ doğrultusundaki elektrik dipol momenti bileşenidir. Eğer \vec{D}_{ba} (veya \vec{r}_{ba}) sıfır olmuyorsa, geçişin izinli olacağı söylenir, eğer \vec{D}_{ba} sıfırsa geçiş yasaklanmıştır. Eğer M_{ba} denklem (2.3.14)'teki yaklaşıklık yapılmamış biçimiyle sıfır olursa, bu geçişin tam anlamıyla yasaklanmış olduğu söylenir. Fakat geçişler, iki fotonun eş zamanlı iyonlaşmasıyla oluşabilir.

Şimdi denklem (2.3.74)'te θ , $\hat{\epsilon}$ ile r_{ba} vektörleri arasındaki açı olarak tanımlanırsa,

$$\sigma = \frac{4\pi^2 \omega}{\hbar c} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) |\vec{r}_{ba}|^2 \cos^2 \theta \quad (2.3.75)$$

yazılır. Burada

$$|\vec{r}_{ba}|^2 = |x_{ba}|^2 + |y_{ba}|^2 + |z_{ba}|^2 \quad (2.3.74)$$

dir. Kutuplanmamış foton demeti için $\hat{\epsilon}$ 'nin yönelimi gelişi güzel olacağından $\cos^2 \theta \cong \frac{1}{3}$

yazılmaktadır. Bu durumda,

$$\sigma = \frac{4\pi^2 \omega}{3\hbar c} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) |\vec{D}_{ba}|^2 \quad (2.3.76)$$

olur.

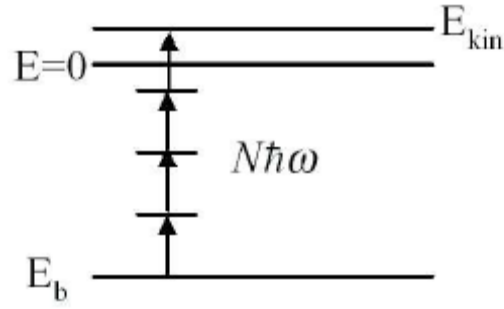
3. LAZER ALANINDA İYONLAŞMA SÜREÇLERİ

Lazer teknolojisi, 1960 yılında gelişmeye başlamıştır ve o günden bugüne lazer teknolojisinde inanılmaz büyük gelişmeler olmuştur. Günümüzde kızılötesi, morötesi ve görünür bölgedeki dalgalarda lazer ışığı elde edilebilmektedir. Uygulama alanları çok geniş olan lazer, tek renkli olma ve uyumcul olma özelliklerinin hayli iyi olmasının yanında, aynı zamanda son derece iyi yönlendirilebilme ve son derece şiddetli ışıklı bölgeler oluşturacak şekilde odaklanabilme özelliklerine de sahiptir. Lazer teknolojisi ile ilk çoklufoton iyonlaşma deneyleri 1970'te tamamlandı [6]. 1979 yılında da eşik üzeri iyonlaşma süreci ile çalışmalar yapılmaya başlandı [7]. Böylece bu bölümde çoklufoton iyonlaşması ve eşik üzeri iyonlaşmanın tanımı yapılacaktır.

3.1 ÇOKLUFOTON İYONLAŞMASI (MPI)

Düşük ışık şiddetinde, bir elektronun uzaklaşması, bir foton enerjisinin ($\hbar\omega$) iyonlaşma potansiyelini aşması ile gerçekleşir. Zayıf şiddet bağıllığında, güçlü bir dalga boyu bağımlılığının gözlenmesi, Einstein tarafından 1905'te keşfedilen fotoelektrik etkinin temelini oluşturmaktaydı.

İyonlaşma sürecinde $\hbar\omega < E_b$ ise, iyonlaşmanın oluşması için daha fazla fotona ihtiyaç vardır.



Şekil 3.1 Çoklufoton iyonlaşma sürecinin şematik diyagramı, atom, $(\hbar\omega)$ enerjisi, bağlanma enerjisinden (elektronun E_b si) daha küçük olan N fotonlarının soğurulması yoluyla iyonlaşır.

Çoklufoton iyonlaşmasında (MPI), atom $\hbar\omega$ enerjili N fotonlu akımdan dolayı lazer şeklinde görülür. Eğer soğurulan enerji bağlanma enerjisinden yüksekse, elektron çoklufoton soğurma yoluyla sürekliliğe geçer.

Sonuçta elektronun kinetik enerjisi;

$$E_{kin} = N\hbar\omega - E_b \quad (3.1.1)$$

ifadesi ile verilir.

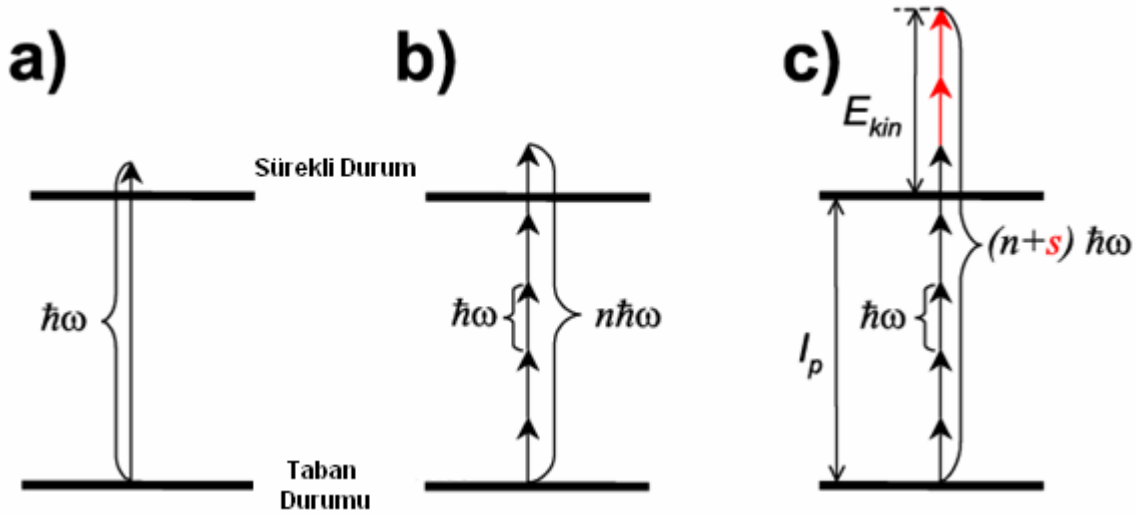
MPI, Max Bornun öğrencisi olan Maria Goppert Maier'in doktora tezinde tartışılmıştır [8]. MPI, tam olarak en düşük mertebeye tedirginme teorisi ile modellenenebilir. Bu süreçte elektrik alan kuvveti, atomik elektrik alan kuvvetinden daha küçüktür. Bu koşullar altında Coulomb potansiyelinden kaynaklanan küçük tedirginme için Schrödinger dalga denkleminin çözümlerinde tedirginme kuramı kullanılır. Çoklufoton iyonlaşması (MPI), birkaç fotonun soğurulmasının, iyonlaşma potansiyelini geçmek için gerekli olduğu durumdur. Böylece bu bölgede foton yoğunluğu önemlidir. Bu bölgedeki iyonlaşma oranı Γ_n ile gösterilirse N -foton iyonlaşma oranı;

$$\Gamma_n = \sigma_N I^N \quad (3.1.2)$$

formülü ile verilir. Burada N iyonlaşma için minimum foton sayısı, I lazer şiddeti, σ_N ise kesit alanı olarak verilir. Bu süreç, fotonun çekirdekten saçılmasına yardım eder. Eğer foton enerjisi iyonlaşma enerjisine eşit ise iyonlaşma olasılığı artar. Bu süreçte eşik üzeri iyonlaşma (ATI) süreci olarak adlandırılır [9].

3.2 EŞİK ÜZERİ İYONLAŞMA (ATI)

1979 yılında Agostini ve *çalışma arkadaşları*, deneysel bir çalışma yardımıyla altı tane foton ile iyonlaşan Xenon atomunun enerji spektrumunu açıklamaya çalışmıştır. İyonlaşma süreci için elde edilen denklemin, denklem (4.1.1)'den tamamen farklı olduğunu ileri sürmüşlerdir. Nd-cam lazer kullanarak iyonlaştırdığı Xenon atomları için $E_b = 12.27$ eV ve $\hbar\omega = 12.34$ olarak hesaplanmıştır [7]. Bu süreçte altı tane foton salarak iyonlaşan Xenon atomu için elde edilen spektrumda ilk atmanın enerjisini 2eV olarak belirlemiştir. Bu olguyu ise soğurulan fotonların sayısı ile ilişkilendirerek, iyonlaşma için gerekli olan N foton sayısından daha fazla fotona ihtiyaç olduğu şeklinde bir yaklaşım ile açıklamıştır. Bu süreç Eşik Üzeri İyonlaşma (ATI) diye tanımlanır. Şekil.3.2.1 (c) bu süreci anlatmaktadır [10].



Şekil 3.2.1 İyonlaştırma mekanizmalarının şematik diyagramı a) bir-foton iyonlaşması; b) n fotonlar ile çoklu foton iyonlaşması; c) (n+s) fotonları ile eşik-üzerindeki iyonlaşma

Bu sürecin kinetik enerji ve iyonlaşma oranının tanımı aşağıdaki gibi genelleştirilebilir

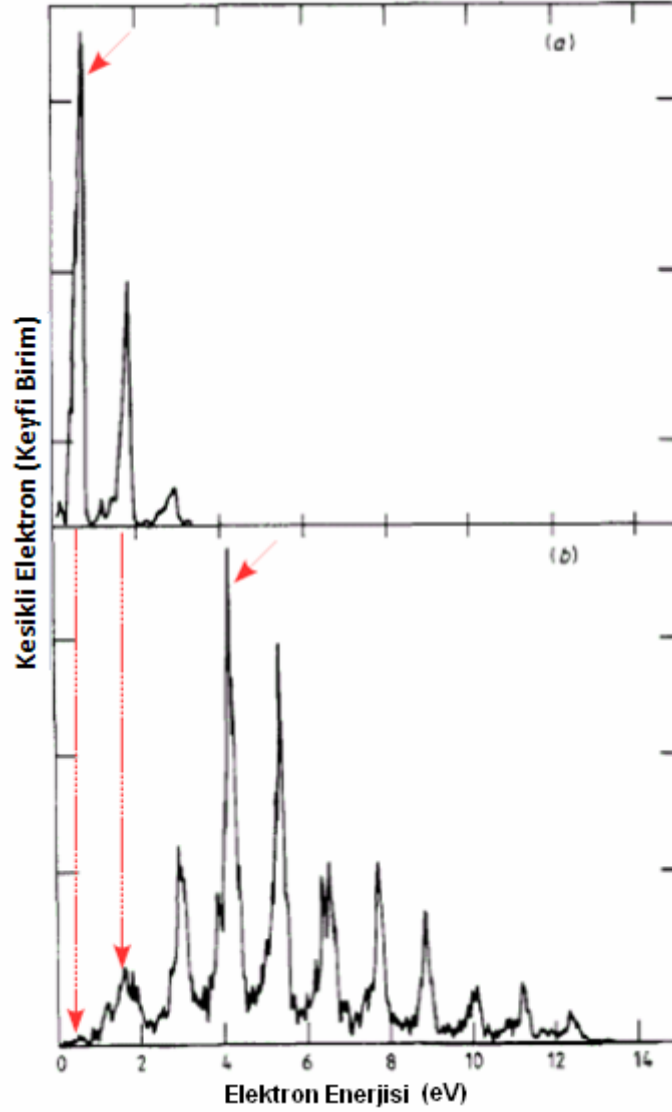
$$E_{kin} = (N + s)\hbar\omega - E_b \quad (3.2.1)$$

ve

$$\Gamma_n \propto I^{N+s} \quad (3.2.2)$$

şeklinde dir.

Lazer yoğunluğu arttırıldığı zaman, iyonlaşma oranı da artar. Buna rağmen lazer yoğunluğu ve frekansı iyonlaşma oranını tekrar düşürmeye başlar ve böylece atomun yaşam ömrü artar [11,12].



Şekil 3.2.2 ATI elektron enerji tayfında Xe $\lambda = 1064nm$ ile 130 lazer atması [10]
 (a) $I = 2.2 \times 10^{12} W / cm^2$; (b) $I = 1.1 \times 10^{13} W / cm^2$.

Xenon'nun ATI tayflarının bir örneği Şekil 3.2.2 de gösterilir. Bu buluştan sonra enerji-kararlı fotoelektron tayfları farklı atomlar ve moleküller için ayrıntılı bir şekilde farklı dalga boylarındaki lazerlerle çalışıldı [13, 14, 15, 16, 17] .

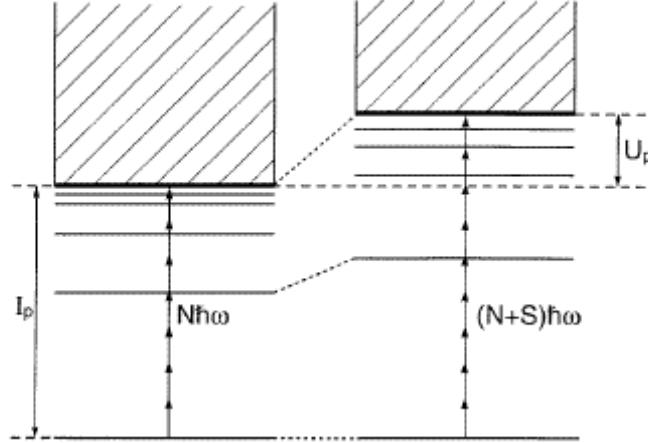
ATI'nin başka bir dikkate değer özelliği fotoelektron tayflarında düşük-enerji zirvelerinin daha baskın olmasıdır. Bu etki lazer şiddetini arttırmakla meydana gelir (ilk iki zirve Şekil 3.2.2 de oklarla gösterilmektedir). Bu baskınlığın sebebi, dış alanın varlığındaki atomik durumların enerjileri olan AC-Stark yarılmalarıdır. Düşük lazer frekansı için AC-Stark yarılmaları en düşük durumlarda önemli değildir ve ihmal edilebilir. Yani AC-Stark yarılmaları denmesinin sebebi, lazer alanı ile atom etkileşmelerinde meydana gelen foton alanı

tarafından son seviyelere uyarılma sonucunda soğurma ve yayma oluşmasıdır. Bu etki, salınım alanında uyarılan fotonların enerjilerinin yarılmalarına sebep olur. Bu yüzden bu yarılmalara, AC- Stark yarılmaları denmektedir. Fotonların dalga boylarının uzun olması nedeniyle taban enerji seviyelerinde AC-Stark yarılmaları küçük olmaktadır. Diğer taraftan, sürekli enerji seviyelerinin güçlü alanlar tarafından yarılmaları taban enerji seviyelerine göre daha belirgindir.

Serbest elektronlar, salınan elektromanyetik alanda hızlanır ve bu salınma hareketinden kaynaklanan ortalama kinetik enerji güçlü lazer alan fiziğinde *Ponderomotive Enerjisi* U_p olarak tanımlanır. Çoklufoton fiziğinde önemli bir parametredir ve

$$U_p = \frac{e^2 E_0^2}{4m\omega^2} \quad (3.2.3)$$

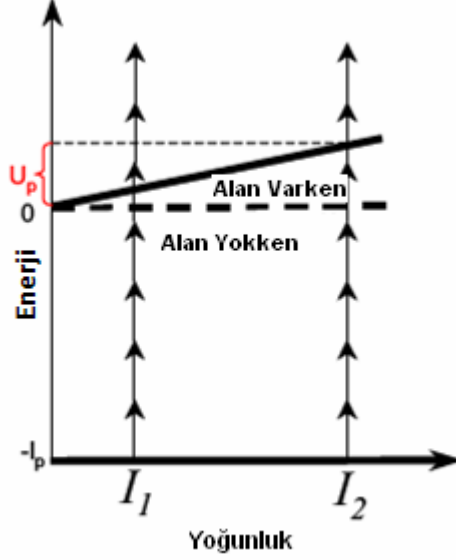
ile verilir. Burada m kütle, e elektron yükü, E_0 elektrik alan kuvveti ve ω lazer frekansı olarak verilir.



Şekil 3.2.3 Enerji seviyeleri: Solda, iyonlaşma için düşük şiddete N fotonları gerektirir, fakat şiddeti artırmak için daha yüksek duruma uzanan ponderomotive enerjisi U_p ile ekstra bir S fotonu iyonlaşma için gerekli olur.

Güçlü lazer alanında, U_p ponderomotive enerjisi nedeniyle iyonlaşmanın oluşması için fotona ihtiyaç olabilir. Bunun anlamı da rezonans durumunda bir çok seviyenin ayrılması sırasında kendi enerjilerinin foton enerjilerinden bir miktar daha büyük olmasından

kaynaklanır. Elektronların ponderomotive enerjilerinin elde edilmesi, alanda salınan elektronlarla ilişkilidir.



Şekil 3.2.4 Lazer şiddetine bağlı iyonlaşma potansiyelinin Stark yarılması. I_1 şiddetinde beş-fotonun iyonlaşmasıyla meydana gelir, oysa yüksek ışık şiddeti I_2 de iyonlaşma için birden fazla fotona ihtiyaç vardır. U_p tarafından artırılır.

Lazer alanında iyonlaşma engeli Şekil 3.2.4'te U_p tarafından artırılır ve son fotoelektron enerjisi;

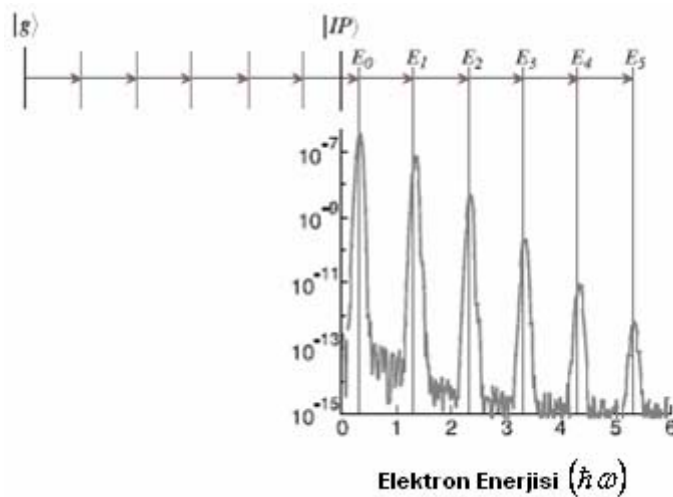
$$E = (n + s)\hbar\omega - (I_p + U_p) \quad (3.2.4)$$

olarak verilir.

Şekil 3.2.4'te iyonlaşma eşiğinin AC-Stark yarılmalarını göstermektedir. I_1 lazer şiddetinde $n=5$ fotonun soğurulması ile iyonlaşma görülebilir ama I_2 şiddetinde yasaktır. Burada atomu iyonlaştırmak için daha fazla fotona ihtiyaç duyulur. Ancak, deney esnasında lazer atması boyunca merkezde düzgün değişen bir lazer şiddeti ile karşı karşıya kalınır ve I_1 'e karşılık gelen zirve tamamen kaybolmaz. Bu olay Şekil 3.2.2'de lazer şiddeti artırıldığında enerji zirveleri açık renk oklarla gösterilir. Düşük enerji baskınlığına rağmen Şekil 3.2.2'de ATI zirvelerinin konumları, ışık şiddetinin artışı ile değişmez. Odaklanmış

lazer ışınımına yoğunluğunun değişimi nedeniyle serbest elektron $-\nabla U_p$ kuvvetine maruz kalır. Lazer alanında fazladan bu kuvvet tarafından hızlandırılan elektron, eksik U_p ponderomotive enerjisiyi tekrar kazanır. Bu, uzun lazer atmalarıyla ($\gg 1ps$) mümkündür [10].

Agostini ve *çalışma arkadaşları* tarafından eşik üzeri iyonlaşmanın keşfiyle güçlü lazer atom fiziği tedirginmemiş bölgeye girer. Atomların lazer ışını ile oluşturulan fotoelektron kinetik enerji tayflarını oluşturur. İyonları hesap etmenin yolu toplam iyonlaştırma oranları yoluyla ölçülür ve bu da düşük mertebe tedirginme teorisi (LOPT) ile elektron alan etkileşimi olarak tanımlanır. Bu (LOPT) bölge yüksek ölçüde çizgisel olmayan bölgedir (Mainfray ve Manus 1991). En düşük mertebe iyonlaştırma için minimum N sayıda foton gerektirir. ATI tayfı foton enerjileri tarafından zirvelerin yarılmasıyla oluşur bu da Şekil 3.2.5'te görülür [18].



Şekil 3.2.5 Bu şekil fotoelektron tayfında eşik üzeri iyonlaşmanın yoğunluk bölgesidir ve Schrödinger denkleminin sayısal çözümünün sonucunu gösterir. (Paulus,1996)

Bu zirveleri atomun N minimum sayısından daha çok fotonu soğrulabileceğini gösterir. 1980'de foton tayfı lazer ışını tarafından araştırıldı (McPherson ve arkadaşları, 1987; Wildenauer,1987). Tayfta yüksek-mertebe harmonik üretimin (HHG) düzlüğü gösterilir (Ferray ve arkadaşları, 1988). Yani harmonik sayısının artışı ile önce harmonik üretim azalır ve harmonik şiddetinin harmonik mertebesinden hemen hemen bağımsız olması düz bir bölge tarafından izlenir. Son olarak da kesikli olarak adlandırılan kuantum bir yol izler. Bu

kesikli ve düz bölge elektronun çekirdeğe geri dönüp yeniden saçılmasını içeren “*simple-man model*” i olarak açıklanır. Bu saçılma esnek ya da esnek olmayan saçılma şeklindedir. Esnek saçılma ATI spektrumuna katkıda bulunur. HHG (Lewenstein ve arkadaşları, 1994; Becker ve arkadaşları, 1994b) ve ATI (Becker ve arkadaşları, 1994a; Lewenstein ve arkadaşları, 1995a) tamamen kuantum mekaniksel tanımlamalarda görülür. Bu kuantum mekaniksel genelleme klasiksel yörüngelerin “*simple-man model*” ini korur. Lazerin atom fiziğinin alanı Kulander, Lewenstein (1996b), son zamanlarda ise Joachain ve arkadaşları (2000) tarafından incelenmektedir [18].

4. ÇOKLUFOTON SÜREÇLERİNDE DİPOL OLMAYAN ETKİLER

Çoklufoton süreçlerinin birçok kuramsal çalışmalarında, lazer-atom etkileşmelerini içerir ve bu etkileşmelerde görelilik etkilerinin ihmal edilme nedenleri belirtilir. Lazer alanındaki dipol yaklaşımı ile homojen uzaydaki vektör potansiyeli $\vec{A}(t)$ olarak tanımlanır. Lazer alanında elektrik alan bileşeni $\vec{E}(t) = -\frac{d\vec{A}(t)}{dt}$ olarak verilirken manyetik alan bileşeni yoktur, çünkü $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}(t) = 0$ olur. Süper yoğun lazer alanında, atom ve lazer alanının etkileşmesinde dipol olmayan kuantum etkilerini araştırılır.

Görelilik olmayan ve dipol yaklaşımında düşük frekanslarda güçlü alan olgularını, nitel olarak Kuchiev [19], van Linden van den Heuvell and Muller [20], Corkum [21], Kulander ve arkadaşları [22] yarı-klasik çarpışma modelini kullanarak incelediler. Bu model, güçlü alan iyonlaşmasında ve harmonik üretimin düşük frekansların da birkaç olayla anlatılmaktadır [23].

4.1 GÜÇLÜ LAZER ALANINDA MANYETİK ALAN ETKİLERİ

Bu konuda yapılan araştırmaların çoğu yoğun alanı incelemektedir, atomların lazer etkileşmelerindeki manyetik alanın $\frac{v}{c}$ etkileri önemlidir, fakat tamamen kaçınılan görelilik düzeltmelerin $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ etkilerinin davranışı önemsizdir. Atomik fizikte, dipol yaklaşım terimleri elektromanyetik alanların optiksel frekansı şeklinde tanımlanır, a_0 Bohr yarıçapı ve λ dalga boyunun yer aldığı eşitsizlik,

$$\frac{a_0}{\lambda} \ll 1 \quad (4.1.10)$$

şeklindedir. Düzlem dalgaının faz hızı $\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r} \approx \omega t$ yaklaşımı olarak ifade edilebilir. Hız ayarı kullanıldığında vektör potansiyeli \vec{A} 'nın uzaysal koordinatından bağımsız olması sonucunu verir, bundan dolayı $\vec{\nabla} \times \vec{A} = 0$ olur ve hiçbir manyetik alan yoktur. Uzunluk ayarında belirtilen skaler potansiyel terim $\Phi = -\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t)$ dır ve burada da hiçbir manyetik alan yoktur. Atom yeterince yoğun bir alana maruz bırakıldığında, görelî enerjiler fotoelektron üretebilir ve tamamen görelî davranış gerektirir. Artık burada dipol yaklaşım geçerli değil ve manyetik alan da mevcut değildir; fakat elektrik alana benzer olması önemlidir. Özellikle, Lorentz kuvveti güçlü elektromanyetik alanda yüklü bir tanecikte [24],

$$\vec{F} = e \left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c} \times \vec{B} \right) \quad (4.1.11)$$

şeklindedir. Burada e yük, \vec{E} elektrik alan, \vec{B} manyetik alan ve $\frac{\vec{v}}{c}$ de hızdır. Gaussian birimlerinde, üretilen elektromanyetik düzlem dalga alanında $|\vec{E}| = |\vec{B}|$ 'dir. Bunun anlamı $\frac{v}{c} \rightarrow 1$ olmadıkça, manyetik alan etkileri önemsiz olacaktır. Manyetik alan etkilerinin $\frac{v}{c}$ olarak elektrik alan gibi davrandığı görülür. Görelî olmayan momentum $\vec{p} = m\vec{v}$ dir, burada m kütle, \vec{v} hızdır, oysa uygun görelî momentum $\vec{p} = m\vec{v}\gamma$ 'dir. γ sabiti açık bir şekilde yazılırsa [24],

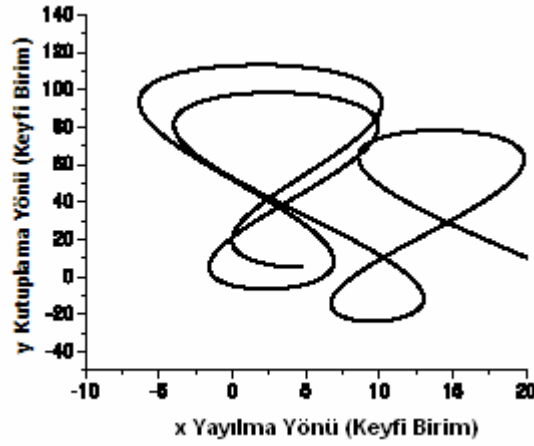
$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \\ &= 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{v}{c}\right)^2 + \frac{3}{8} \left(\frac{v}{c}\right)^4 + \dots \end{aligned} \quad (4.1.12)$$

olur. Görelî etkiler, $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ etkileridir [25].

Yoğun alanların etkileri $\frac{v}{c}$ olarak tahmin edilir, fakat $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ ise artık gerekli değildir.

Bu alanların yoğun sınırları önemli bir frekansa bağlıdır. Bölgenin yoğun alanını betimlemek için, serbest elektron hareketi düzlem dalga alanında ifade edilir. Böylece düzlem dalga alanının hareketi uygulandığında elektrik ve manyetik alan hareketinin

birleşimi “Figür- 8” hareketine neden olur [26–27]. “Figür- 8” hareketi, kutuplanma vektörü olarak tanımlanır.



Şekil.4.1 “Figür- 8” hareketinin yüksek şiddet alanında elektronun yörüngesi için bir diyagram.

Figürde, uzun eksen elektrik alan yönünü ve kısa eksen düzlem dalga alanının yayılma yönünü ifade eder. “Figür- 8” hareketinin kısa eksen boyutu, manyetik alan etkisinin bir ölçüsüdür. Bu boyut atomun boyutu olarak aynı büyüklükte olduğu zaman dipol davranışından sonra fiziksel göstermelere sahip olmalıdır ve bunlardan biri manyetik alan için hesaplanmalıdır [28].

4.1.1 MANYETİK ALAN ETKİLERİNİN KATKI SUNDUĞU BÖLGE

Güçlü alan deneylerinde, serbest elektronun parametresi z_f olarak kullanılır. Böylece güçlü alan deneyleri, $z_f \ll 1$ olduğu bir ortamda yapılır ve görelî olmayan bir durumla karşılaşılır. Bu durum dipol yaklaşım için uygun olabilir, çünkü $\frac{a_0}{\lambda} \ll 1$ durumu güçlü alan ortamında kabul edilir. Dipol yaklaşım için uygun olan serbest bir elektronun v hızıyla yayılma yönü paralel bir şekilde hareket ettirilmelidir. Sadece tek bir dalga periyodu τ ’nun küçük bir kesiri, dalga boyunca uzanır. Yani,

$$v\tau \ll \lambda ; \quad v \ll v\lambda = c \quad \text{veya} \quad \frac{v}{c} \ll 1$$

olur [25]. Bu klasik mekanikteki durum görelî yaklaşım olmayan bir durumdur. Elektron düzlem dalganın elektromanyetik alanında düz çizgi olarak serbestçe hareket etmez. Onun

yerine düz çizgi hareketi olan “Figür- 8” hareketi tamamlanır. Böylece yayılma yönüne paralel olan genlik,

$$\frac{|x|}{\lambda} = \left(\frac{\xi}{8}\right) \left(\frac{c}{\lambda\omega}\right) \quad (4.1.13)$$

şeklindedir. λ dalga boyu, ω dairesel frekans, ξ sabit bir parametre ve c ışık hızıdır.

Yukarıdaki denklemde $z_f \ll 1$ durumlarında $\frac{c}{\lambda\omega}$ faktörü $\frac{1}{2\pi}$ ve $\frac{\xi}{8} \approx \frac{z_f}{4}$ olarak gösterilir.

Böylece verilen denklemde elde edilen alan genliği basitçe,

$$\frac{|x|}{\lambda} \approx \frac{z_f}{8\pi} \quad (4.1.14)$$

olur. Yukarıda yapılan işlemler serbest elektronla ilgilidir. Elektronun a_0 durumu bağlayıcı bir potansiyele benzetilirse a_0 Bohr yarıçapı ne olur diye bir soru kafayı karıştırabilir. Bu da λ dalga boyu, a_0 Bohr yarıçapı karşılaştırıldıktan sonra $|x|$ 'te yerine yazılır. Öncelikle $\xi \approx 2z_f$ olarak alınır ve denklemde yerine yazılırsa,

$$\frac{|x|}{a_0} = \left(\frac{z_f}{4}\right) \left(\frac{c}{a_0\omega}\right) \quad (4.1.15)$$

olur. “Figür- 8” hareketinin genişliği Bohr atom çapına eşit olduğu zaman ise serbest elektronun yoğunluk parametresi,

$$z_f = 4a_0 \frac{\omega}{c} \quad (4.1.16)$$

şeklinde olur. ω dairesel frekans, c ışık hızıdır. Sonra bu parametre üzerinde yapılan bazı çalışmalar sonucu,

$$z_f = \frac{2U_p}{mc^2} \quad (4.1.17)$$

şekline dönüşür. U_p ponderomotive enerji, mc^2 durgun enerjidir. Yani yoğunluk parametresi iki kez ponderomotive enerjinin, durgun enerjiye oranı olarak tanımlanabilir [24].

Güçlü alan foton iyonlaşmada merkezi bir elementin elektromanyetik alanın düzlem dalgasında serbest elektron olarak davranır. Bu problem hem klasik hem de kuantum mekaniksel olarak çözülür. Klasik olayda,

$$E = mc^2 - \frac{e^2 \vec{A}^2}{2mc^2} \quad (4.1.18)$$

şeklindedir. \vec{A}^2 , \vec{A}^μ iç çarpım kuralına göre elektromanyetik “dört-vektör” potansiyelinin karesidir,

$$A^2 \equiv A^\mu A_\mu = A^\mu A_\mu = (A^0)^2 - \vec{A}^2 = \Phi^2 - \vec{A}^2 \quad (4.1.19)$$

şeklinde yazılır. Buradaki skaler potansiyel A^0 veya Φ olarak her iki şekilde yazılabilir. \vec{A} “üç-vektör” potansiyeli olarak gösterilir. μ indisi 0,1,2,3 ve üzeri değerler alabilir. Denklem (4.1.18)’de ilk terim elektronun görelî durgun enerjisi ve ikinci terim ponderomotive potansiyelidir. Denklem (4.1.19)’da ponderomotive enerjinin görelî dönüşümünü gösterir. Ponderomotive enerji “dört-vektör” potansiyeli bakımından ifade edilmesine rağmen, ayar dönüşümünden bağımsızdır. Genel ayar dönüşümü,

$$A^\mu \rightarrow A'^\mu = A^\mu + \partial^\mu \Lambda \quad (4.1.20)$$

şeklinde yazılır. Λ skaler potansiyeldir. Ek olarak “basit” ayar dönüşümü için görelî uzunluk ve hız ayarı arasında dönüşümler olduğu zaman $A^\mu A_\mu = A'^\mu A'_\mu$ şeklinde gösterilir. Böylece sonuca varmak ve herhangi bir ölçekte ponderomotive enerjisini değerlendirmek mümkündür. Coulomb ayarı $A^0 = 0$ ve $|\vec{A}|^2 = |\varepsilon|^2 / \omega^2 c^2$ olarak seçilir. Denklemde ω dairesel frekans, ε elektrik alan vektörü ve c ışık hızıdır.

Böylece ponderomotive enerjisi,

$$U_p = \frac{e^2 \varepsilon^2}{4m\omega^2} \quad (4.1.21)$$

şeklinde tanımlanır [25].

Denklem (4.1.16)'da belirtilen serbest elektron yoğunluk parametresi z_f ile yoğunluk parametresi z arasındaki ilişki,

$$z = \frac{U_p}{\hbar\omega} \quad (4.1.22)$$

olarak tanımlanır. Burada ω dairesel frekans, \hbar planck sabitidir. Net yoğunluk parametresi sonucu,

$$z = 2 \frac{a_0}{\hbar/mc} (\approx 275). \quad (4.1.23)$$

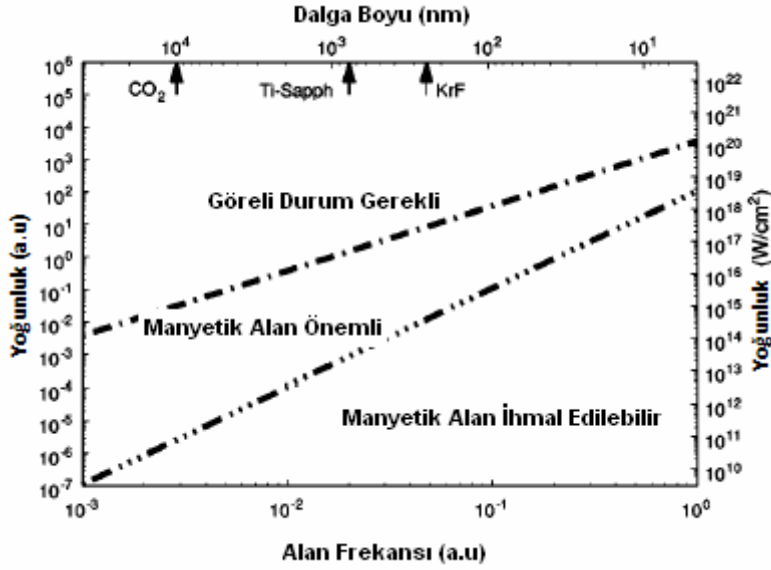
şeklini alır. Burada Bohr yarıçapının elektronun Compton oranının iki kez alınması şeklinde tanımlanır. Böylece manyetik alan olduğu zaman yoğunluk parametresi,

$$z > \sim 27.5 \quad (4.1.24)$$

değerini alır. Göreli etkiler de [25,29] serbest elektronun yoğunluk parametresi,

$$z_f \approx 0.1 \quad (4.1.25)$$

değerini almaktadır.



Şekil.4.1.1 Manyetik alanın önemli olduğu nokta alt eğim çizginin yukarısı ile üst eğim çizginin alt kısmıdır ve eğim çizgileri herhangi bir frekansta birleşmez. Manyetik alanın önemsiz olduğu bölge ise alttaki eğim çizgisinin alt tarafta kalan alandır. Ayrıca üst eğim çizgisinin yukarısında kalan alanda görel etkileri göstermektedir. Lazer frekanslarına güçlü alan etkileri için şeklin en üst dalga boyu ölçeği oklarla belirtilmiştir [24].

Şekil 4.1.1 üst eğim çizgisi $z_f = 0.1$ çizgisi olarak tanımlanır. Yoğun bir alan için $U_p, \frac{1}{\omega^2}$ olarak değişir. Bunun anlamı; yoğunluk parametresinin $z \propto \frac{1}{\omega^3}$ ve serbest elektronun yoğunluk parametresinin $z_f \propto \frac{1}{\omega^2}$ şeklinde değişmesidir. Güçlü frekansa bağlı (4.1.24) ve (4.1.25) denklemlerinin manyetik alan etkileri, CO₂ lazer ışınında 10¹¹ W/ cm² düşük yoğunlukta önemli olabilir, oysa görel etkide KrF lazer ışını 10¹⁸ W/cm² de önemli olmayabilir [24].

Şekil 4.1.1'de iki eğim çizgisi vardır. En aşağıdaki eğim çizgisinin alt kısmı manyetik alanının $\frac{v}{c}$ etkileri ihmal edilebilir ve iki eğim çizgisi arasında kalan kısımda manyetik alan için önemli olabilir. Görel etkiler için de aynı amaç kullanılır. Görel etkilerin $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ de üst çizginin alt kısmı ihmal edilebilir, fakat üst çizginin üst kısmı görel etkiler için önemlidir.

Çizgilerin nereden çekilmesi gerektiğini belirlemek için alınan ölçütler, boyutsuz olan yoğunluk parametresine bağlıdır, bu da enerji oranları bakımından tanımlanır. Bunu

anlamanın en kolay yolu görelidir. U_p ponderomotive enerjisi, elektromanyetik alanda yüklü bir taneciğin temel etkileşim enerjisidir. Yüklü bir parçacık minimum etkileşim enerjili bir alana sahiptir, çünkü yüklü bir parçacığın salınım alanında tamamen kalması imkânsızdır. Bu minimum etkileşim enerjisi, yüklü bir parçacığın mc^2 durgun enerjisi ile karşılaştırılabilir kadar yeterince büyük ise görelilik etkileri önemli olur.

4.2 ELEKTRİK VE MANYETİK ALANIN DÜZLEM DALGAYA ETKİLERİ

Elektromanyetik alan \vec{E} elektrik ve \vec{B} manyetik alanlarının ikisini de içerir. Bunların her ikisi de sadece dipol yaklaşım içinde tutulur. Buna rağmen, temel olan düzlem dalga bağıntısı,

$$\vec{B} = \hat{k} \times \vec{E}$$

olur ve dalga yayılması \hat{k} yönünde birim vektördür. Yirmi yıl önceki [30] birçok makalede hız ayarının, çok güçlü alan etkileri hesaplandığında konum ayarından birçok avantajı olduğu doğrulandı. Burada, görelilik bağlamında konum ayarının minimum ifadesinin uzantısını verir. Bu ayarın ifadesi uyumsuz olmayan uygun başlama noktası olur ve sonucun skaler potansiyeline bakılır ve

$$\Phi = -\vec{r} \cdot \vec{E}(\varphi), \quad \varphi = \omega t - \vec{k} \cdot \vec{r} \quad (4.2.1)$$

şeklinde, fakat elektrik alan için tamamen bir düzlem dalga fazıdır. Ayrıca benzer olarak görünen vektör potansiyeli,

$$\vec{A} = -\hat{k} [\vec{r} \cdot \vec{E}(\varphi)], \quad \hat{k} \equiv \frac{\vec{k}}{\omega/c} \quad (4.2.2)$$

olarak tanımlanmaktadır. \hat{k} yayılma yönünde birim vektördür. Belirtilen bu potansiyeller, elektrik ve manyetik alanın faza bağımlılığı $\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}$ ile tanımlanır. Böylece elektrik ve manyetik alanlar,

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}, \quad \vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (4.2.3)$$

olarak doğrulanır. Özellikle yukarıdaki potansiyellerin dipol sınırını alırsak,

$$\Phi = -\vec{r} \cdot \vec{E}(\varphi), \quad \vec{A} = -\hat{k}[\vec{r} \cdot \vec{E}(\varphi)] \quad (4.2.4)$$

$$\begin{aligned} \vec{E} &= -\vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}(\omega t)}{\partial t} \\ \vec{E} &= -\vec{\nabla}(-\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t)) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} [-\hat{k}(\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t))] \\ &= \vec{E}(\omega t) - \frac{1}{c} \frac{\vec{k}}{\omega/c} \frac{\partial}{\partial t} [(-\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t))] \\ &= \vec{E}(\omega t) + \vec{k} \left[\vec{r} \cdot \frac{d\vec{E}(\omega t)}{d(\omega t)} \right] \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

şeklinde elde edilir. Dipol yaklaşımındaki fazla terimler düşürülür, böylece,

$$\left| \frac{d\vec{E}(\omega t)}{d(\omega t)} \right| = O(|\vec{E}|), \quad |\vec{k}||\vec{r}| = O\left(2\pi \frac{a_0}{\lambda}\right) \ll 1 \quad (4.2.6)$$

olur. Manyetik alan doğrudan vektör potansiyelinin rotasyonelini verir.

$$\vec{B}(\omega t) = \hat{k} \times \vec{E}(\omega t) \quad (4.2.7)$$

$\frac{v}{c}$ küçük ve manyetik alan önemsiz olduğunda, yüklü bir taneciğin en temel hareketi elektrik alanına paralel salınım hareketidir. Hareket düz bir çizgi boyunca uzanır. Ancak alan güçlü olduğu zaman $\frac{v}{c}$ oranı artar ve manyetik alan rolü oynamaya başlar. Bu da denklem (4.1.2)'de gösterilir. Düzlem dalga yayılmasında (lazer alanı gibi) \vec{E} ve \vec{B} alanları birbirine diktirler. \vec{E} , \vec{B} ve \vec{k} 'nin ortak bir şekilde dik oldukları ve üçlü bir vektör oluşturdukları tanımlanır, örneğin kartezyen koordinatlardaki x, y, z şeklindeki gibi olur. $\frac{v}{c}$ etkilerinin artırılmasında elektrik ve manyetik alanların etkileri karşılaştırılır. Böylece denklem (4.1.2)'ye göre her ikisi de birbirlerine dik bir şekilde hareket üretirler o da \vec{k} yönünde olur. Manyetik alan etkilerine ulaşmanın farklı bir yolu, en son Salamin [31] tarafından bulundu

ki, Salamin güçlü alan yaklaşımının (SFA) vektör potansiyelindeki $\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}$ faz bağıllığını artırdı [32].

4.3 ETKİLEŞME HAMILTONYENİ

Etkileşim Hamiltonyenin özellikleri dipol elektrik ve manyetik alanda bahsedildiği gibi Schrödinger denklemi ile meydana gelir. Etkileşim Hamiltonyeni manyetik bileşenin Compton dalga boyunun elektron mertebesini gösterir. Atomun düzlem dalga alanı için Schrödinger Hamiltonyeni,

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{p} - \frac{\hat{k}}{c} e\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t) \right]^2 + V(\vec{r}) - e\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t) \quad (4.3.1)$$

olur. $V(\vec{r})$ atomik potansiyel, $\vec{p} = \frac{\hbar \vec{\nabla}}{i}$ momentum işlemcisidir. Alan varlığından dolayı etkileşme Hamiltonyeni;

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{p}^2 - 2 \left(\frac{\vec{p} \cdot \hat{k}}{c} \right) e\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t) - \frac{\vec{k}^2}{c^2} (e\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t))^2 \right] + V(\vec{r}) - e\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t)$$

şeklinde açılır. Yukarıdaki denklemde ilk terim $\frac{v}{c}$ çarpanı küçüktür ama üçüncü terim $\left(\frac{v}{c}\right)^2$ çarpanı ilk terimden daha küçüktür. Bu yüzden yoğunluğun sağlanması için üçüncü terim düşürülür. Yani;

$$H = \frac{1}{2m} \left[\vec{p}^2 - 2 \left(\frac{\vec{p} \cdot \hat{k}}{c} \right) e\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t) \right] + V(\vec{r}) - e\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t)$$

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \left(\frac{\vec{p} \cdot \hat{k}}{mc} \right) e\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t) + V(\vec{r}) - e\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t)$$

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) - \left(\frac{\vec{p} \cdot \hat{k}}{mc} \right) e\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t) - e\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t)$$

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) - e\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t) \left(1 + \frac{\vec{p} \cdot \hat{k}}{mc} \right)$$

olur. Bilindiği gibi Hamiltonyen, $H = H_0 + H_I$ 'ya eşittir. Buradan $H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$ olursa geriye kalan tarafta H_I etkileşme hamiltonyenini verir. Böylece

$$H_I = -e\vec{r} \cdot \vec{E}(\omega t) \left(1 + \frac{\vec{p} \cdot \hat{k}}{mc} \right) \quad (4.3.2)$$

şeklinde elde edilmiş olur.

Etkileşim Hamiltonyeninde düzlem dalga $\hat{k} \cdot \vec{E} = 0$ ve \vec{p} momentum işlemcisi boyunca $\vec{r} \cdot \vec{E}$ olarak kullanıldı. Denklem (4.3.2)'nin ikinci terimi manyetik alan kısmıdır. \vec{p} momentum işlemcisinin ifadesinde elektrik alan etkilerinin $\frac{v}{c}$ oranı rol oynar, düzlem dalga \hat{k} yayılma yönüne bağlıdır. Bu bağ, "Figür- 8" hareketinin temelini oluşturur [24].

5. GÖRELİ ETKİLER

Bu bölümde, öncelikle görelî dinamiğin ilk denklemi olan Klein Gordon denklemini ve $\frac{1}{2}$ spinli parçacıkların görelî dinamiğini tanımlayan Dirac denklemi uygulanır. Sonra Dirac denkleminin görelî etkileri de içeren Schrödinger denklemine geçiş yapılır.

Güçlü alan yaklaşıklığı (SFA) yöntemi kullanılarak zamana bağlı Schrödinger dalga denkleminin çözümleri elde edilir ve dipol moment matris elemanlarının nasıl hesaplanacağı tartışılmaktadır.

5.1 KLEİN-GORDON DENKLEMİNDEN DİRAC EŞİTLİĞİNE GEÇİŞ

Bir elektronun manyetik alanla etkileşimini tanımlayabilmek için, elektronun doğal serbestlik derecesini spin işlemcileri temsil eder. Dirac, bu doğal serbestlik derecesinin görelî kuantum teorisinden otomatik olarak açığa çıktığını göstermiştir. Görelî dalga eşitliğine ulaşabilmek için bunu görelî olmayan Schrödinger eşitliğine benzer tarzda bir türetilme elde edilir. Güç etkimeyen bir parçacığın enerji ve momentumu arasındaki klasik bağıntıyla

$$E = p^2 / 2m_0 \quad (5.1.1)$$

işe başlanır. E enerjisi ile p momentum bileşenleri aşağıdaki işlemcilerle değiştirilir:

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (5.1.2)$$

$$p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, p_y \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, p_z \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \quad (5.1.3)$$

En son eşitlik

$$\vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \quad (5.1.4)$$

şeklinde yazılabilir. Kuantum mekaniğinin hesaplama kurallarına uyulursa bu işlemciler Ψ dalga fonksiyonları üzerine uygulanmalıdır ve denklem (5.1.1) iyi bilinen Schrödinger denklemi halini alır;

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \vec{\nabla}^2 \Psi \quad (5.1.5)$$

Enerji ve momentum arasındaki ilişki uygulanırsa

$$E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} \quad (5.1.6)$$

şeklindedir. E ve p denklem (5.1.2) ve denklem (5.1.3)'e göre işlemcilerle değiştirilir ve denklem (5.1.6)'nin her iki yanındaki sonuç ifadelerinin bir Ψ dalga fonksiyonuna etkimesine izin verilirse

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \sqrt{-c^2 \hbar^2 \vec{\nabla}^2 + m_0^2 c^4} \Psi \quad (5.1.7)$$

ifadesi elde edilir. Bu eşitlik, ilk bakışta, sadece bir kozmik bozulmaya karşılık olarak gözükebilecek, karekök işareti altında ∇^2 Laplace işlemcisini içerir. Bununla birlikte, böyle bir dalga eşitliğinde elektron üzerinde elektrik ve manyetik alanların etkileri içerilmeye çalışıldığında bu yaklaşım oldukça büyük hata verir. Böylece teori “çıkamaz sokağa” girmiştir. Fizikçiler bunun tekrar yoluna devam edebilmesi için iki yol kullanmışlardır:

1. Yol: Klein-Gordon Eşitliği

Bütün bu zorluklar denklem (5.1.7) deki karekökten kaynaklandığından, bunu aşmanın bir yolu bulunmaktadır. Bu durumda denklem (5.1.6) nın her iki yanının karesini alırsak

$$E^2 = p^2 c^2 + m_0^2 c^4 \quad (5.1.8)$$

sonucunu elde ederiz. Bunu hemen

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = (-c^2 \hbar^2 \vec{\nabla}^2 + m_0^2 c^4) \Psi \quad (5.1.9)$$

dalga şekline sokabiliriz. Bu eşitlik Klein-Gordon denklemi adını alır. En son yazılan eşitliğin, her iki yanını $c^2 \hbar^2$ 'ye bölünürse ve

$$\square^2 = \vec{\nabla}^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \quad (5.1.10)$$

işlemcisi tanıtılırsa daha iyi (ve görece olarak daha açık) şekilde düzenlenebilir. Böylece eşitlik Klein-Gordon eşitliği

$$\square^2 \Psi = \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \Psi \quad (5.1.11)$$

olarak verilir. Bu çözümler incelenirse serbest bir parçacık için çözümlerin de-Broglie dalgaları olması beklendiğinden

$$\Psi = \exp[i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)] \quad (5.1.12)$$

deneme fonksiyonu kullanılır. Her zaman olduğu gibi

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (5.1.13)$$

dır. Denklem (5.1.12) denklem (5.1.9)'da yerine yazılırsa denklem (5.1.8) sonucu elde edilir.

E enerjisini belirlemek için doğal olarak bunun karekökü alınır. Böylece, sadece

$$E = +\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} \quad (5.1.14)$$

pozitif enerji değil, aynı zamanda

$$E = -\sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} \quad (5.1.15)$$

negatif enerji de elde edilir. Serbest parçacıklar sadece pozitif enerjiye sahip olabileceklerinden burada zorlukla karşılaşılır! Bundan başka, çözümlerin analizi parçacık yoğunluğunun da fiziksel bir sonuç olmayan negatif değer alabileceğini söyler. Klein-Gordon eşitliği, kütle yoğunluğu yerine yük yoğunluğunu kullanıp, böylece bunun kuantum alanında sıfır spinli parçacıklara uygun olacağını bulan Pauli ve Weisskopf tarafından yeniden yorumlanmıştır.

2.Yol: Dirac Eşitliği

Dirac, problemi denklem (5.1.6)'daki kökü daha basit bir şekilde çalışılmıştır. $p = 0$ limitinde

$$\sqrt{\bar{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4} \rightarrow m_0 c^2$$

ve $m_0 = 0$ için

$$\sqrt{\bar{p}^2 c^2 + m_0^2 c^4} \rightarrow p.c \quad (5.1.16)$$

bulunur. Dirac'ın yaklaşımını anlayabilmek için, bir boyutlu durumu ele alınıp denklem (5.1.16)

$$\sqrt{p_x^2 c^2 + m_0^2 c^4} = \alpha c p_x + \beta m_0 c^2 \quad (5.1.17)$$

ifadesi genellenir. Bilinen α ve β sayılarıyla bu bağıntı $p_x \neq 0, m_0 \neq 0$ genel durumunda açık olarak sağlanamaz; bununla birlikte α ve β matrisleri gösterileceği gibi denklem

(5.1.17)'nin her iki yanının karesi alınır ve matrisler yer değiştirir. Böylece α ve β 'nin sırasını denklem (5.1.17) ile sağ taraftan çarpılır. Bunun sonucunda

$$p_x^2 c^2 + m_0^2 c^4 = \alpha^2 c^2 p_x^2 + (\alpha\beta + \beta\alpha)m_0 c^3 p_x + \beta^2 m_0^2 c^4 \quad (5.1.18)$$

elde edilir. Bu eşitliğin sağ ve sol taraflarının eşit olabilmesi için açık olarak

$$\alpha^2 = 1, \quad \alpha\beta + \beta\alpha = 0, \quad \beta^2 = 1 \quad (5.1.19)$$

şartları gerçekleştirilir. Bu bağıntılar (pauli) spin matrislerinden bilinir. Ama ne yazık ki bir boyutludan çok boyutlu ifade edilir.

$$\sqrt{(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)c^2 + m_0^2 c^4} = \alpha_1 c p_x + \alpha_2 c p_y + \alpha_3 c p_z + \beta m_0 c^2 \quad (5.1.20)$$

şartının sağlanması genellenmektedir. Denklem (5.1.20)'nin karesinden, bir-boyutlu durumdaki gibi

$$\alpha_j^2 = 1, \quad \beta^2 = 1, \quad \alpha_j \beta + \beta \alpha_j = 0; \quad \text{ve} \quad (5.1.21)$$

$$\alpha_j \alpha_k + \alpha_k \alpha_j = 0, \quad (j \neq k) \quad j = 1,2,3 \quad k = 1,2,3$$

sonuçları bulunur. Ek olarak kuantum mekaniğinde her zaman olduğu gibi işlemciler(matrisler) Hermityendir. Bu bağıntılar

$$\alpha_j = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{bmatrix}, \quad \beta = \begin{bmatrix} +I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix} \quad (5.1.22)$$

örneğinde olduğu gibi değişik bir çok yolla sağlanabilirler. β 'daki birim matrislerini içeren 2x2'lik matrisleridir. Burada σ_j ler Pauli spin matrisleri

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (5.1.23)$$

notasyonunda yazılabilir. Yine denklem (5.1.2) ve denklem (5.1.4) dönüştürme kuralları uygulanırsa

$$E = \alpha_1 cp_x + \alpha_2 cp_y + \alpha_3 cp_z + \beta m_0 c^2 \quad (5.1.24)$$

eşitliğine uygulanarak Dirac eşitliğine tekrar bakılır. Buradan

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = (\alpha_1 cp_x + \alpha_2 cp_y + \alpha_3 cp_z + \beta m_0 c^2) \Psi \quad (5.1.25)$$

denklemini elde edilir ve dirac eşitliğine götürür. α_j ve β 4x4'lük matrisler olduklarından bunlar dört bileşenli vektörler üzerine uygulanmak zorundadır; yani

$$\Psi = \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{bmatrix} \quad (5.1.26)$$

olur [34].

İlk olarak vektör potansiyeli $\vec{A}(\vec{r}, t) = 0$ ve skaler potansiyeli $\Phi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r})$ niceliğindeki Dirac hamiltonyeni

$$H = c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2 + q_e \Phi \quad (5.1.27)$$

şeklindedir. Dirac, $\frac{\partial}{\partial t}$ ye göre çizgisel olan (görelili olmayan)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H \Psi(\vec{r}, t) \quad (5.1.28)$$

Schrödinger denkleminin benzeyen bir dalga denklemi aramakla işe başlanır. Denklem (5.1.26)'daki dört bileşenli spinör $\Psi(\vec{r})$, iki bileşenli spinör Ψ_1 ve Ψ_2 şeklinde parçacık ve antiparçacık dalga fonksiyonları oluşturur. Yani

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} \quad (5.1.29)$$

olarak ifade edilir. $H\Psi = E\Psi$ ifadesini kullanılarak denklem (5.1.27),

$$(c\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta mc^2 - q_e\Phi)\Psi = E\Psi \quad (5.1.30)$$

ifadesini verir. Denklem (5.1.30) ifadesinde $\vec{\alpha}$ ve β matrisleri ile (5.1.29) denklemi kullanılarak

$$\begin{pmatrix} E + q_e\Phi & 0 \\ 0 & E + q_e\Phi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \\ c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} mc^2 & 0 \\ 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = 0$$

şeklinde yazılır. Buradan Ψ_1 ve Ψ_2 spinörlerinin birbirine bağlı iki denklemi,

$$\begin{aligned} (E + q_e\Phi)\Psi_1 - c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\Psi_2 - mc^2\Psi_1 &= 0 \\ (E + q_e\Phi)\Psi_2 - c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\Psi_1 + mc^2\Psi_2 &= 0 \end{aligned} \quad (5.1.31)$$

sağladığı görülür. Göreli olmayan limit için $E' = E - mc^2$ olarak yazılırsa

$$(E' + q_e\Phi)\Psi_1 - c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\Psi_2 = 0 \quad (5.1.31a)$$

$$(E' + q_e\Phi + 2mc^2)\Psi_2 - c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\Psi_1 = 0 \quad (5.1.31b)$$

bağıntıları yazılır ve taraf tarafa çözülür. Buradan

$$\Psi_2 = \frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E' + q_e\Phi + 2mc^2} \Psi_1 \quad (5.1.32)$$

olarak bulunur. Dolayısıyla Ψ_2 'nin Ψ_1 'den p/mc yani (v/c , burada v hızın büyüklüğüdür) çarpanı kadar küçük olduğu görülür. İki spinör bileşeni Ψ_1 ve Ψ_2 bu halde sırayla büyük ve küçük bileşenler olarak bilinir.

Denklem (5.1.32)'yi denklem (5.1.31a) 'ya yerleştirilirse,

$$E'\Psi_1 = -q_e\Phi\Psi_1 + c\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \frac{c\vec{\sigma}\cdot\vec{p}}{E' + q_e\Phi + 2mc^2} \Psi_1$$

$$E^{\wedge}\Psi_1 = \left[-q_e\Phi + \frac{1}{2m}\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\left(1 + \frac{E' + q_e\Phi}{2mc^2}\right)^{-1} \vec{\sigma}\cdot\vec{p} \right] \Psi_1 \quad (5.1.33)$$

şeklinde olur. Yukarıdaki denklemde $\left[1 + \frac{E' + q_e\Phi}{2mc^2}\right]^{-1} \cong \left[1 - \frac{E' + q_e\Phi}{2mc^2}\right]$ nin kuvvetleri cinsinden açarak en düşük mertebede yazılır. Böylece denklem (5.1.33)

$$E^{\wedge}\Psi_1 = \left[-q_e\Phi + \frac{1}{2m}\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\left(1 - \frac{E' + q_e\Phi}{2mc^2}\right)\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \right] \Psi_1 \quad (5.1.34)$$

olarak görelî olmayan limit şeklinde yazılır. Sonra aşağıdaki kural uygulanır

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{A})(\vec{\sigma}\cdot\vec{B}) = \vec{A}\cdot\vec{B} + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{A}\times\vec{B}) \quad (5.1.35)$$

ve bu kural yardımıyla elde edilen ifadeler açılır. Denklem (5.1.34)'te

$$E^{\wedge}\Psi_1 = \left[\frac{1}{2m}\vec{\sigma}\cdot\vec{p}\left(1 - \frac{E' + q_e\Phi}{2mc^2}\right)\vec{\sigma}\cdot\vec{p} \right] \Psi_1$$

kısmıyla ilgilenilecektir. Kuralı birinci ve ikinci

kısım için yazalım

$$E^{\wedge}\Psi_1 = \left[\frac{1}{2m}(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})(\vec{\sigma}\cdot\vec{p}) \right] = \frac{\vec{p}^2}{2m} \Psi_1 \quad (5.1.35a)$$

$$E^{\wedge}\Psi_1 = \left[\frac{1}{2m}(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\left(-\frac{E'}{2mc^2}\right)(\vec{\sigma}\cdot\vec{p}) \right] = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m}\left(-\frac{E'}{2mc^2}\right) \right] \Psi_1 \quad (5.1.35b)$$

$$E^{\wedge}\Psi_1 = \left[\frac{1}{2m}(\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\left(-\frac{q_e\phi}{2mc^2}\right)\varphi(\vec{r})(\vec{\sigma}\cdot\vec{p}) \right] = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m}\left(-\frac{q_e\phi}{2mc^2}\right) \right] \Psi_1 \quad (5.1.35c)$$

şeklinde olur. $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ işlemcisi \vec{r} 'ye bağılı bir işlemci olduğu için $\varphi(\vec{r})$ 'yi kullanarak işleme devam edilebilir. Yine (5.1.35) kuralı uygulanırsa

$$(\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla}(-q_e\phi))(\vec{\sigma}\cdot\vec{\nabla}) = (\vec{\nabla}(-q_e\phi)\cdot\vec{\nabla}) + i\vec{\sigma}\cdot(\vec{\nabla}(-q_e\phi)\times\vec{\nabla}) \quad (5.1.36)$$

şeklinde olur. Bu ifade açık şekilde yazılırsa

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}(-q_e \phi))(\vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}) = -\frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} (\vec{\nabla}(-q_e \phi) \cdot \vec{\nabla} \Psi_1) + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla}(-q_e \phi) \times \vec{p} \Psi_1) \quad (5.1.36a)$$

olur. Bulunan bu ifadeler denklem (5.1.34)'te yerine yazılırsa

$$E \Psi_1 = \left[-q_e \Phi + \frac{\vec{p}^2}{2m} \left(1 - \frac{E' + q_e \Phi}{2mc^2} \right) \right] \Psi_1 - \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} [\vec{\nabla}(-q_e \Phi) \cdot \vec{\nabla}(\Psi_1)] + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla}(-q_e \Phi) \times \vec{p} \Psi_1) \quad (5.1.37)$$

eşitliği elde edilir. Burada potansiyel enerji $V = -q_e \Phi$, momentum $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$, olduğundan sağ taraftaki üçüncü terim ifade $E' - V \approx \vec{p}^2 / 2m$ olduğundan $\frac{\vec{p}^2}{2m} \frac{E' - V}{2mc^2} \cong -\frac{\vec{p}^4}{8m^3 c^2}$ olarak yazılabilir. Yukarıdaki ifade de $\vec{\nabla} \phi = -\vec{E}$ ve $\vec{\nabla} \times \vec{E} = 0$ kuralları kullanılır. Denklem (5.1.37)'in sağ taraftaki sondan ikinci terim potansiyel enerjideki (v^2/c^2 mertebesinde) göreli düzeltmedir ve hermitik olmaması nedeniyle bazı güçlükler getirir. Güçlüğün orijini, başlangıçtaki dört bileşenli Dirac dalga fonksiyonu bire boylandırılmış ise yani

$$\int (\Psi_1^+ \Psi_1 + \Psi_2^+ \Psi_2) dr = 1 \quad (5.1.37a)$$

şeklinde ise o zaman iki bileşenli spinor Ψ_1 'in boylandırma koşulunu sadece yaklaşık olarak sağlaması gerekir. Darwin, Ψ_1 'i boylandırmanın (5.1.37)'deki sondan ikinci terim yerine simetrik bileşim (hermitik),

$$\frac{1}{2} \left[\left(-\frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} \frac{dV}{dr} \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \left(-\frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} \frac{dV}{dr} \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right)^+ \right] = \left[\frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \nabla^2 V(\vec{r}) \right] \Psi \quad (5.1.37b)$$

yerleştirerek elde edileceğini göstermiştir [3]. Elde edilen ifadeler (5.1.37) denkleminde yerleştirilirse

$$E \Psi_1 = \left(V + \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\vec{p}^4}{8m^3 c^2} - \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot (\vec{E} \times \vec{p}) \right) \Psi_1 \quad (5.1.38)$$

elde edilir.

İkinci adım olarak vektör potansiyeli $\vec{A}(\vec{r}, t) \neq 0$ ve ayar dönüşümleri altında $\vec{p} \rightarrow (\vec{p} + q_e \vec{A})$ olarak denklem (5.1.33)'e uygulanırsa

$$E'\Psi_1 = \left[-q_e \Phi + \frac{1}{2m} \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + q_e \vec{A}) \left(1 - \frac{E' + q_e \Phi}{2mc^2} \right) \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + q_e \vec{A}) \right] \Psi_1 \quad (5.1.39)$$

denkleme dönüşür. Denklem (5.1.35)'te yazılan kural, denklem (5.1.39) için uygulanırsa

$$\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + q_e \vec{A}) \vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + q_e \vec{A}) = [(\vec{p} + q_e \vec{A})^2] + i \vec{\sigma} \cdot ((\vec{p} + q_e \vec{A}) \times (\vec{p} + q_e \vec{A})) \quad (5.1.40)$$

şeklinde olur. Yukarıdaki denklemde son terim için

$$(\vec{p} + q_e \vec{A}) \times (\vec{p} + q_e \vec{A}) = q_e (\vec{p} \times \vec{A} + \vec{A} \times \vec{p}) = -i\hbar q_e \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad (5.1.41)$$

ifadesi bulunur. Yukarıda denklemde $i\hbar \vec{\nabla} \times \vec{A}$ bir işlemcidir. Bulunan bu ifade $\vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{B}$ ve \vec{B} manyetik alandır ve (5.1.41) deklemini

$$q_e (\vec{p} \times \vec{A} + \vec{A} \times \vec{p}) = -i\hbar q_e \vec{B} \quad (5.1.42)$$

olarak yazılır. Bulunan bu ifade denklem (5.1.39) için ek bir katkı niteliğindedir ve

$$E'\Psi_1 = \left(\frac{\left(\vec{p} + \frac{\vec{A}}{c} \right)^2}{2m} + V - \frac{\left(\vec{p} + \frac{\vec{A}}{c} \right)^4}{8m^3 c^2} - \frac{\hbar^2}{8m^2 c^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} + \frac{1}{4m^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{E} \times \left(\vec{p} + \frac{\vec{A}}{c} \right) \right) + \frac{i\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right) \Psi_1$$

şeklinde bulunur. Denklem daha düzgün hale dönüştürülürse

$$E^{\wedge}\Psi_1 = \left(\frac{\vec{p}^2}{2m} + V + \frac{\vec{p}\vec{A}}{mc} + \frac{\vec{A}^2}{2mc^2} - \frac{\left(\vec{p} + \frac{\vec{A}}{c}\right)^4}{8m^3c^2} - \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} + \frac{1}{4m^2c^2} \vec{\sigma} \cdot \left(\vec{E} \times \left(\vec{p} + \frac{\vec{A}}{c} \right) \right) + \frac{i\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right) \Psi_1$$

(5.1.43)

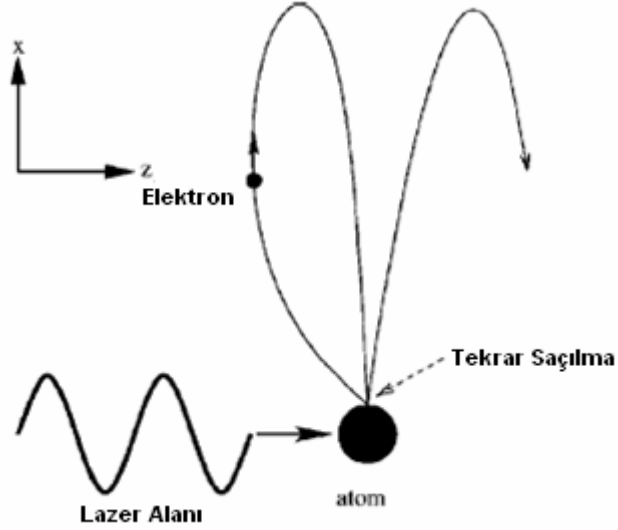
ifadesi elde edilir. Hamiltonyen

$$H = H_0 + H_i^V + H_{kin}^V + H_D + H_{SO}^V + H_P$$

ile verilir. Burada Hamiltonyen teker teker açılırsa

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_i^V + H_P + H_{kin}^V + H_D + H_{SO}^V, \\ H_0 &= \hat{p}^2/2 + V(\vec{r}), \\ H_i^V &= \hat{p}_x A(z,t)/c + A(z,t)^2/2c^2, \\ H_P &= \vec{\sigma} \cdot \vec{B}/2c, \\ H_{kin}^V &= -(\hat{p} + \vec{A}/c)^4/8c^2, \\ H_D &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{E}_T/8c^2, \\ H_{SO}^V &= -\vec{\sigma} \cdot [\vec{E}_T \times (\hat{p} + \vec{A}/c)]/4c^2 \end{aligned} \quad (5.1.44)$$

Şeklinde olur [35,36]. H_0 serbest atomik hamiltonyeni, $V(\vec{r})$ atomik potansiyelini, H_i^V tedirginme işlemcisinin, $\hat{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ elektron momentumu, $\vec{A} = A(z,t)\hat{e}_x$ lazer alanında vektör potansiyelini, H_P spin-manyetik alan etkileşimini, H_{SO}^V spin-yörünge çiftlenimi, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ Pauli matris vektörünü, \vec{E}, \vec{B} lazer alanında elektrik ve manyetik alanları, $\vec{E}_T = \vec{E} - \vec{\nabla}V(\vec{r})$ toplam elektrik alanı, H_{kin}^V görelî kütle değişimini ve H_D Darwin terimini gösterir [35].



Şekil 5.2.1 İyonik çekirdeğin lazer alanında iyonlaşma süreci sırasında iyonlaştırılan elektronun saçılmasını içerir. Lazer alanında x kutuplanma yönünü ve z ise yayılma yönünü gösterir.

Uzay koordinatının ikinci mertebeye bağlı vektör potansiyeli:

$$A(z,t) = A(t) + zE(t) - \left(\frac{z^2}{2c}\right)\dot{E}(t) \quad (5.1.45)$$

şeklindedir. Ayrıca elektrik alanın zamana göre türevi $\dot{E}(t)$ olarak gösterilir [35]. Serbest atomun bağlanma durumu için dalga fonksiyonu kullanılır ve bu bağlanma durumundaki matris elementinin geçişindeki uzunluk ayar dönüşümü

$$|\Psi(t)\rangle \rightarrow \exp[iA(t)x/c]|\Psi(t)\rangle \quad (5.1.46)$$

olarak tanımlanır.

Hız ayar dönüşümünden uzunluk ayar dönüşümü için

$$H_i^V = \frac{p_x A(z,t)}{c} + \frac{A(z,t)^2}{2c^2} \quad (5.1.47)$$

$$H_0 = \frac{p^2}{2} + V(\vec{r})$$

tedirginme işlemcisi ve serbest atomik hamiltonyen kullanılır. Yukarıdaki denklemleri denklem (5.1.28)'de yerine yazılırsa

$$i \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(\frac{\vec{p}^2}{2} + \frac{p_x A(z, t)}{c} + \frac{A(z, t)^2}{2c^2} + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}, t) \quad (5.1.48)$$

şeklinde olur. Denklem(5.1.45) denklem (5.1.48)'de kullanılırsa

$$i \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(\frac{\vec{p}^2}{2} + \frac{p_x A(t)}{c} + \frac{p_x z E(t)}{c} - \frac{p_x z^2 \dot{E}(t)}{2c^2} + \frac{\left(A(t) + zE(t) - \frac{z^2}{2c} \dot{E}(t) \right)^2}{2c^2} + V(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}, t)$$

Böylece yukarıdaki denklemde uzunluk ayar dönüşümünü uygulanır. Ayrıca uzunluk ayar dönüşümünde H_0, H_p ve H_D değişmez kalmaktadır.

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_L = \left(\vec{p}^2 + Ex + \frac{p_x z \bar{E}(t)}{c} - \frac{p_x z^2 \bar{E}(t)^2}{2c^2} + \frac{z^2 \bar{E}^2}{2c^2} + V(\vec{r}) \right) \Psi_L \quad (5.1.51)$$

Uzunluk ayar dönüşümünde etkileşme hamiltonyeni, spin yörünge çiftlenim hamiltonyeni ve görelî kütle değişim hamiltonyeni yazılırsa

$$\begin{aligned} H_i^L(t) &= Ex(t) + \frac{\hat{p}_x E(t) z}{c} - \frac{\hat{p}_x \dot{E}(t) z^2}{2c^2} + \frac{E(t)^2 z^2}{2c^2} \\ H_{SO}^L &- \vec{\sigma} \cdot (\vec{E}_T \times \hat{p}) / 4c^2 \\ H_{kin}^L &= -\hat{p}^4 / 8c^2 \end{aligned} \quad (5.1.52)$$

şeklinde olur [35]. Spin yörünge çiftlenim hamiltonyeni ve görelî kütle değişim hamiltonyeninde sadece $1/c^3$ terimi ihmal edildiği için denklem yukarıdaki şekilde yazılabilir.

Lazer alanında iyonlaşma metotları için denklem (5.1.44) ve denklem (5.1.51)'deki farklı terimler belirlenir ve aynı zamanda 0.18 mertebesinde ξ 'nin değerlerine bağlı yaklaşımlar öne sürülür. Böylece $H_0, H_0 \cong U_p$ şeklinde seçilir. Lazer alanında yayılma

yönü ve kutuplanma momentumu ve elektron koordinatı x, p_x, z, p_z ölçümü yapılır. Ölçülen parametreler $x \cong (c/\omega)\xi$, $p_x \cong c\xi$, $z \cong (c/\omega)\xi^2$, $p_z \cong c\xi^2$ şeklindedir [37]. Burada kuvvetli alanın görelî parametresi

$$\xi = \frac{eA_0}{mc^2} \quad (5.1.53)$$

şeklindedir. A_0 vektör potansiyelinin genliği, e elektron yükü, m elektron kütlesi ve c ışık hızıdır. Lazer alanında karakteristik enerji ponderomotive enerjisidir. Yani;

$$U_p = \frac{mc^2\xi^2}{4} \quad (5.1.54)$$

şeklinde tanımlanır. Denklem (5.1.53), denklem (5.1.54)'te yerine yazılması sonucu ponderomotive enerji

$$U_p = \frac{e^2 A_0^2}{4mc^2} \quad (5.1.55)$$

şekline dönüşür. Denklem (3.2.3) ile denklem (5.1.55)'in taraf tarafa oranından

$$\frac{A_0^2}{E^2} = \frac{c^2}{\omega^2} \rightarrow \frac{A_0}{E} = \frac{c}{\omega} \quad (5.1.56)$$

oluşur ki buradan da A_0 genliği,

$$A_0 = \frac{Ec}{\omega} \quad (5.1.57)$$

şeklinde elde edilir. Denklem (5.1.53)'teki mc^2 durgun kütlenin (5.1.54)'te yerine yazılması sonucu

$$U_p = \frac{Ec\xi}{\omega} \quad (5.1.58)$$

elde edilir. Böylece $x = \frac{c\xi}{\omega}$ olmak üzere etkileşme hamiltonyenindeki birinci terim yerine

$$H_i^{(1)} = E(t)x \cong U_p \quad (5.1.59)$$

yaklaşıklığı yazılır. Etkileşme hamiltonyenindeki ikinci terimde denklem (5.1.58)'deki $E(t)$ terimi ile $p_x \cong c\xi$ teriminin yerine yazılması sonucu

$$H_i^{(2)} = \frac{p_x E(t)z}{c} \cong \left(\frac{\omega z}{c} \right) U_p \quad (5.1.60)$$

olur. Etkileşme hamiltonyenindeki üçüncü terim için $\vec{E}(t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}$ denkleminden

$\dot{E}(t) = -\frac{\omega^2 A_0}{c}$ elde edilip bu terim ile $p_x \cong c\xi$ teriminin denklemde yerine yazılırsa

$$H_i^{(3)} = \frac{p_x \dot{E}(t)z^2}{2c^2} \cong \left(\frac{\omega z}{c} \right)^2 U_p \quad (5.1.61)$$

elde edilir. Denklem (3.2.3)'teki $E(t)^2$ değeri etkileşme hamiltonyenindeki dördüncü terim için kullanılırsa

$$H_i^{(4)} = \frac{E(t)^2 z^2}{2c^2} \cong \left(\frac{\omega z}{c} \right)^2 U_p \quad (5.1.62)$$

olur. Denklem (5.1.62)'deki spin magnetik alan çiftlenim hamiltonyenindeki \vec{B} magnetik alanı için $\vec{B} = \frac{\vec{E}}{c}$ denklemi yazılır ve denklem (5.1.57)'deki $E(t)$ değeri magnetik alanda yerine yazılırsa

$$H_p = \frac{B}{2c} \cong \omega \xi \quad (5.1.63)$$

şeklinde olur. Denklem (5.1.62)'deki görelî kütle değişimi için $H_0 = \frac{p^2}{2} \cong U_p$ olduğunu hatırlanırsa ve denklem (5.1.54)'te kullanılırsa

$$H_{kin} = \frac{p^4}{8c^2} \cong U_p \xi^2 \quad (5.1.64)$$

olur. Denklem (5.1.62)'deki Darwin terimi için denklem (5.1.61)'de $\dot{E}(t)$ değeri yazılırsa

$$H_D^{(1)} = \frac{\dot{E}(t)}{8c^3} \cong \frac{\xi\omega^2}{8c^2} \quad (5.1.65)$$

şeklinde olur. Denklem (5.1.62)'deki spin yörünge çiftlenimi ise $|H_{SO}^{(1)}| = |1/4c^2 E(\sigma_y p_z - \sigma_z p_y)|$ lazer alanında x eksenini için temsil edilir. Lazer alanında elektron hareketi xz düzlemi için yazılır ki $p_y = 0$ 'dır. Böylece $p_z \cong c\xi^2$ ve denklem (5.1.57) yerine yazılırsa

$$|H_{SO}^{(1)}| = |1/4c^2 E p_z| \cong \omega\xi^2 \quad (5.1.66)$$

elde edilir. Spin yörünge çiftleniminde $|H_{SO}^{(2)}| = |1/4c^2 E_C p_x|$ Coulomb alanı için

$E_C \cong \frac{Z}{a_B^2} \cong \frac{I_p}{a_B}$ denklemi kullanılır. Burada a_B Bohr yarıçapı ve Z iyon yüküdür.

Böylece $p_x \cong c\xi$ değerinde yerine yazılırsa

$$|H_{SO}^{(2)}| \cong \frac{\xi I_p \lambda_C}{a_B} \quad (5.1.67)$$

olur. Buradaki Compton dalga boyu $\lambda_C = \frac{1}{c}$ olarak alınır. Spin yörünge çiftleniminde

güçlü alan yaklaşımından $|H_{SO}^{(1)}| \gg |H_{SO}^{(2)}|$ şeklinde elde edilir.

Hamiltonyen terimlerinin oranları için elde edilen ölçümler için açısal frekans $\omega = 0.05$ a.u. ve kuvvetli alanın görelî parametresi $\xi \approx 0.18$ değerleri yazılırsa

$$\begin{aligned}
H_i^{(1)} / H_0 &\approx 1, \\
H_i^{(2)} / H_0 &\cong H_{kin}^L / H_0 \cong \xi^2 \approx 0.03, \\
H_i^{(3)} / H_0 &\cong H_i^{(4)} / H_0 \cong \xi^4 \approx 10^{-3}, \\
H_p / H_0 &\cong \omega / (c^2 \xi) \approx 2 \times 10^{-5}, \\
H_{SO}^L / H_0 &\cong \max\{\omega \xi / c^2, I_p \lambda_c / c^2 \xi a_B\} \approx 5 \times 10^{-7}, \\
H_D^{(1)} / H_0 &\cong \omega^2 / (2c^4 \xi) \approx 10^{-11}
\end{aligned} \tag{5.1.68}$$

şeklinde elde edilir. Ayrıca Darwin teriminde $H_D^{(2)} = -\left(\frac{1}{8c^3}\right)\Delta V(r)$ atomik potansiyelden dolayı katkı gelmez. Elektrik oktopol ve manyetik kuadropol etkileşiminden dolayı $(H_i^{(3)} + H_i^{(4)})$ terimi ihmal edilir. Spin magnetik alan ve spin yörünge etkileşiminden çok küçük katkılar geldiği için ihmal edilebilir [38]. Böylece denklem (5.1.62)'de Schrödinger Hamiltonyeni ile $H = \bar{H}_0 + \bar{H}_i$, burada $\bar{H}_0 = H_0 + H_{kin}^L$ ve $\bar{H}_i = H_i^{(1)} + H_i^{(2)}$ olarak tanımlanır.

5.2 ZAMAN-GELİŞİM İŞLEMCİSİ VE SCHRÖDİNGER DENKLEMİ

5.2.1 ZAMAN-GELİŞİM İŞLEMCİSİ

Bu bölümde ket durumu zamanla nasıl değiştiği sorusu tartışılmaktadır. Fiziksel sistemde ket durumu t_0 'ı betimleyen $|\alpha\rangle$ olarak varsayılır. Genelde aynı durumda kalması için $|\alpha\rangle$ sistemi bekletilir. Zaman durumuna uyan keti ifade etmek için izin verilen denklem;

$$|\alpha, t_0; t\rangle, (t > t_0) \tag{5.2.1}$$

olur ki α, t_0 olarak yazılması $|\alpha\rangle$ durumunu ifade eder. Çünkü zaman sürekli bir parametre olarak farz edilir ve

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\alpha, t_0; t\rangle = |\alpha\rangle \tag{5.2.2}$$

olarak beklenir ve bunun için kısa bir notasyon kullanılır,

$$|\alpha, t_0; t\rangle = |\alpha, t_0\rangle \tag{5.2.3}$$

şeklinde olur. Böylece temel olarak zaman-gelişimin ket durumu çalışılmaktadır. Yani;

$$|\alpha, t_0\rangle = |\alpha\rangle \xrightarrow{\text{zaman-gelişeli}} |\alpha, t_0; t\rangle \quad (5.2.4)$$

olur. Başka bir deyişle, ket durum değişimi $t_0 \rightarrow t$ şeklinde olur.

Dönüşüm olayında olduğu gibi, işlemci ile ilgili olan iki ketin zaman-gelişim işlemcisi

$U(t, t_0)$:

$$|\alpha, t_0; t\rangle = U(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle \quad (5.2.5)$$

şeklindeki metodla tanıtılır. Zaman-gelişim işlemcisini tanıtan işlemci özelliklerinden bir kaçını nedir? İlk önemli özellik birimsel istek için $U(t, t_0)$ 'da olasılık konumundadır. t_0 'da ket durumunun bazıları özket bakımından genişletilir ve A olarak varsayılır. Buda

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} c_{a'}(t_0) |a'\rangle \quad (5.2.6)$$

olur. Genelde her genişleme katsayısının aynı kalması beklenilmez. Yani;

$$|c_{a'}(t)| \neq |c_{a'}(t_0)| \quad (5.2.7)$$

şeklinde olur. Örneğin dönme z yönünde düzenli bir manyetik alana maruz bırakıldığı zaman onun manyetik momentumda dönmesi $1/2$ olarak düşünülür. Özel olarak t_0 'da dönme pozitif x yönünde olduğu varsayılır ki sistemin özdeğeri $\hbar/2$ ile öz durum S_x olarak verilmektedir. Bunun anlamı olasılık için $S_x +$ uyumunun $t > t_0$ 'da bütünlüğünün olmadığıdır; Burada ilk olasılık için $S_x -$ uyumu sınırlıdır. Ancak aritmetik olasılıklar için $S_x +$ ve $S_x -$ birimleri kalır. Genellikle (5.2.7) notasyonunda her genişleme katsayıları için

$$\sum_{a'} |c_{a'}(t_0)|^2 = \sum_{a'} |c_{a'}(t)|^2 \quad (5.2.8)$$

olur. Başka bir yol da ket durumunda önce birim boylandırması;

$$\langle \alpha, t_0 | \alpha, t_0 \rangle = 1 \Rightarrow \langle \alpha, t_0; t | \alpha, t_0; t \rangle = 1 \quad (5.2.9)$$

olursa boylandırılmış birim tamamen kalır. Dönüşüm olayında olduğu gibi, bu özellik zaman-gelişim işlemci birimini verir. Bu birim için;

$$U^+(t, t_0)U(t, t_0) = 1 \quad (5.2.10)$$

olarak alınır ve U işlemcisinin temel özelliklerden biridir. Başka bir özellik olarak U işlemcisinin özelliği [39];

$$U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0), (t_2 > t_1 > t_0) \quad (5.2.11)$$

şeklinde. Bu denklemden t_0 'dan t_2 'ye geçişte zaman gelişimini elde etmekle ilgilenilir sonra t_0 'dan t_1 'e geçişte zaman-gelişimi düşünülerek aynı sonuç elde edilir en sonda t_1 'den t_2 'ye geçişte koşulu uygulanır. Zaman-gelişim işlemcisinin $U(t_0 + dt, t_0)$ avantajı düşünülürse;

$$| \alpha, t_0; t_0 dt \rangle = U(t_0 + dt, t_0) | \alpha, t_0 \rangle \quad (5.2.12)$$

şeklinde meydana gelir. Süreklilikten dolayı (5.2.2) 'de çok küçük zaman-gelişim işlemcisinde birim işlemcisi azaltılmalıdır ve $dt \rightarrow \text{sıfır}$ a gittiği zaman;

$$\lim_{dt \rightarrow 0} U(t_0 + dt, t_0) = 1 \quad (5.2.13)$$

olmaktadır ve dönüşüm olayında olduğu gibi $U(t_0 + dt, t_0)$ arasında farklılık beklenir ve $dt \rightarrow 1$ olduğunda

$$U(t_0 + dt, t_0) = 1 - i\Omega dt \quad (5.2.14)$$

olur ve Ω hermitian işlemcisi

$$\Omega^+ = \Omega \quad (5.2.15)$$

olmaktadır. Denklem (5.2.13)'de en küçük zaman-yerini alan işlemci düzeltme özelliği;

$$U(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0) = U(t_0 + dt_1 + dt_2, t_0 + dt_1)U(t_0 + dt_1, t_0) \quad (5.2.16)$$

olduğu düşünülür, dt düzen terimi birim işlemcisinden ayrılır. Birimsel özellik yazılırsa;

$$U^+(t_0 + dt, t_0)U(t_0 + dt, t_0) = (1 + i\Omega^+ dt)(1 - i\Omega dt) = 1 \quad (5.2.17)$$

olur. $(dt)^2$ düzen terimini veya boyut yüksekliği görmezlikten gelinebilir. Ω işlemcisi frekans boyutu veya ters zaman boyutudur. Kuantum teorisi hatırlanırsa açılmal frekans ω ve Planck-Einstein arasındaki ilişki;

$$E = \hbar\omega \quad (5.2.18)$$

olur. Ω hermitian işlemcisiyle H hamiltonyen işlemcisinin arasındaki ilişki;

$$\Omega = \frac{H}{\hbar} \quad (5.2.19)$$

olarak gösterilebilir. Zaman-gelişim işlemcisi özetlenip yazılırsa;

$$U(t_0 + dt, t_0) = 1 - \frac{iHdt}{\hbar} \quad (5.2.20)$$

ki burada H hamiltonyen işlemcisi hermitien olarak varsayıldı.

5.2.2 SCHRÖDİNGER DENKLEMİ

Diferansiyel denklem için zaman-gelişim işlemcisi $U(t, t_0)$ olarak yazılır. Zaman-gelişim işlemcisinin özelliği $t_1 \rightarrow t, t_2 \rightarrow t + dt$ olarak uygulandığında;

$$U(t_0 + dt, t_0) = U(t + dt, t)U(t, t_0) = \left(1 - \frac{iHdt}{\hbar}\right)U(t, t_0) \quad (5.2.21)$$

ki zamanı farklı olan $t - t_0$ küçük değildir. Yani;

$$U(t_0 + dt, t_0) - U(t, t_0) = -i \left(\frac{H}{\hbar}\right) dt U(t, t_0) \quad (5.2.22)$$

yazılabilir. Diferansiyel denklem için;

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = HU(t, t_0) \quad (5.2.23)$$

şeklinde yazılabilir. Bu zaman-gelişim işlemcisi için yazılan Schrödinger denklemdir. Denklem (5.2.23) ket durumu için Schrödinger denklemine götürülür. Denklem (5.2.23)'ün her iki tarafına $|\alpha, t_0\rangle$ yazılırsa;

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle = HU(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle \quad (5.2.24)$$

olur. Fakat $|\alpha, t_0\rangle$ da t 'ye bağlı değildir. Böylece;

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0; t\rangle = H |\alpha, t_0; t\rangle \quad (5.2.25)$$

olmaktadır. Bu denklem (5.2.23) 'teki zaman-gelişim işlemcisi için Schrödinger denkleminin üç olayı vardır. Bunlar;

1.OLAY: Hamiltonyen işlemcisi zamandan bağımsızdır. Bunun anlamı t parametresi değişir, H işlemcisi ise değişmez kalır. Bu olayda çözümde;

$$U(t, t_0) = \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] \quad (5.2.26)$$

şeklinde yazılır. Üstel ifadenin Taylor serisine açılımından

$$\exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] = 1 - \frac{iH(t-t_0)}{\hbar} + \left[\frac{(i)^2}{2}\right] \left[\frac{H(t-t_0)}{\hbar}\right]^2 + \dots \quad (5.2.27)$$

elde edilir [39]. Bunun zamana göre türevi

$$\frac{\partial}{\partial t} \exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right] = -\frac{iH}{\hbar} + \left[\frac{(i)^2}{2}\right] 2\left(\frac{H}{\hbar}\right)^2 (t-t_0) + \dots \quad (5.2.28)$$

şeklinde olur.

2.OLAY: Hamiltonyen işlemcisi H zamana bağlıdır. Aynı zamanda H farklı zamanlarda sıra değiştirir. Bu olayın çözümünde;

$$U(t, t_0) = \exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt H(t')\right] \quad (5.2.29)$$

şeklinindedir. Bunun ispatı basitçe $H(t-t_0)$ denklem (5.2.27) ve $\int_{t_0}^t dt' H(t')$ denklem (5.2.28)'de yerini alır.

3.OLAY: Farklı zamanlarda H sıra değiştirmez. Bu çözümde;

$$U(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \dots H(t_n) \quad (5.2.30)$$

Dyson serisi olarak bilinir ki F.J Dyson kuantum alan teorisinde tedirginmeyi ifade edilir.

5.2.3 ENERJİNİN ÖZKETİ

Genel olarak ilk ket $|\alpha\rangle$ olarak denklem (5.2.26)'da zaman-gelişim etkisi olarak değerlendirilir. Bu özellik için açıkça temel ket A özket ;

$$[A, H] = 0 \quad (5.2.31)$$

olarak yazılır ve A özketi ile H özketine enerji özketi denilir. $E_{a'}$ öz durum anlamına gelir. Bu da

$$H|a'\rangle = E_{a'}|a'\rangle \quad (5.2.32)$$

olur. Zaman-gelişim işlemcisi için $|a'\rangle\langle a'|$ terimleri genişletildi. $t_0 = 0$ için;

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) &= \sum_{a'} \sum_{a''} |a''\rangle\langle a''| \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) |a'\rangle\langle a'| \\ &= \sum_{a'} |a'\rangle \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \langle a'| \end{aligned} \quad (5.2.33)$$

elde edilir. Zaman-gelişim işlemcisi yazıldığında herhangi ilk değer problemi için ilk terim $\{|a'\rangle\}$ olarak bilinir. Örneğin ilk ket ifadesi;

$$|\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \quad (5.2.34)$$

ile elde edilir ve sonra

$$|\alpha, t_0 = 0 : t\rangle = \exp\left(\frac{-iHt}{\hbar}\right) |\alpha, t_0 = 0\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle \exp\left(\frac{-iE_{a'}t}{\hbar}\right) \quad (5.2.35)$$

şeklinde elde edilmektedir. Eğer sistemde eş zamanlı öz durum A ve H ise bütün zamanlar kalır. Denklem (5.2.31) açıkça H'nin hareket sabiti

$$\begin{aligned} [A, B] &= [B, C] = [A, C] = \dots = 0 \\ [A, H] &= [B, H] = [C, H] = \dots = 0 \end{aligned} \quad (5.2.36)$$

olduğu görülür.

5.3 DYSON SERİSİ

Genel sistem için uygun olan zaman-gelişim işlemcisi, $U(t_0, t)$ 'de;

$$|A, t_0, t\rangle = U(t_0, t)|A\rangle \quad (5.3.1)$$

olarak tanımlanır. Burada, t zaman sisteminde ket durumu $|A, t_0, t\rangle$ dir ve verilen t_0 'ın başlangıç zaman ket durumu $|A\rangle$ dir. Zaman-gelişim işlemcisi kolay bir şekilde görülüyor ki diferansiyel denklem;

$$i\hbar \frac{\partial U(t_0, t)}{\partial t} = (H_0 + H_1)U(t_0, t) \quad (5.3.2)$$

şeklinde yazılabilir. Burada H_0 atomik hamiltonyen, H_1 etkileşme hamiltonyenidir. Böylece bağlı durum olayı;

$$U(t_0, t) = 1 \quad (5.3.3)$$

şeklinde yazılmaktadır. Tedirginliğin yokluğunda, zaman-gelişim işlemcisi kısalmakta ve

$$U(t_0, t) = \exp[-iH_0(t_0, t)/\hbar] \quad (5.3.4)$$

olarak yazılmaktadır. Tedirginlik açıldığında ve çözümüne bakıldığında denklem;

$$U(t_0, t) = \exp[-iH_0(t_0, t)/\hbar]U_I(t_0, t) \quad (5.3.5)$$

şeklini almaktadır. Burada ki, U_I kolay bir şekilde gösterildiği zaman diferansiyel denklem;

$$i\hbar \frac{\partial U_I(t_0, t)}{\partial t} = H_I(t_0, t)U_I(t_0, t) \quad (5.3.6)$$

olur ki burada H_I şöyle olur;

$$H_I(t_0, t) = \exp[+iH_0(t_0 - t)/\hbar]H_I \exp[-iH_0(t - t_0)/\hbar]. \quad (5.3.7)$$

Böylece U_I, H_0 'ın farklı öz durumları arasındaki geçişleri ilgilendiren bütün bilgileri içerir ve tedirginliğe sebep olur. Sistemin t_0 zamanında tedirgin olmamış hamiltonyenin $|i\rangle$ öz durumlarını içerir. Verilen ket durumu;

$$|i, t_0 t\rangle = \sum_m c_m(t) \exp[-iE_m(t - t_0)/\hbar] |m\rangle \quad (5.3.8)$$

olur. Ancak, sadece yazılabilen denklem

$$|i, t_0 t\rangle = \exp[-iH_0(t - t_0)/\hbar] U_I(t_0, t) |i\rangle \quad (5.3.9)$$

şeklinde olur ve bunu takip eden büyüklük;

$$c_n(t) = \langle n | U_I(t_0, t) | i \rangle \quad (5.3.10)$$

olur ki burada $\langle n | m \rangle = \delta_{nm}$ şeklinde kullanılır. Böylece, t_0 zamanında tanımlanan $|i\rangle$ durumunda tanımlanan sistem ve t zamanında $|n\rangle$ tanımlanan sistemin olasılığını basit bir şekilde tanımlanırsa;

$$P_{i \rightarrow n}(t_0, t) = |\langle n | U_I(t_0, t) | i \rangle|^2 \quad (5.3.11)$$

olur. Bu nicelik $|i\rangle$ ve $|n\rangle$ durumları arasındaki geçiş olasılığı olarak tanımlanır. (5.3.6)'da tanımlanan diferansiyel denklem ve buna bağlı olarak (5.3.3)'te tanımlanan bağlı koşul denklemleri kullanılarak yazılan zaman-gelişim işlemcisi;

$$U_I(t_0, t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_I(t_0, t') U_I(t_0, t') dt' \quad (5.3.12)$$

şeklinde olur. Bu yaklaşım altında elde edilen çözüm;

$$\begin{aligned}
U_I(t_0, t) &\cong 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_I(t_0, t) \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t'} H_I(t_0, t'') U_I(t_0, t'') \right] dt' \\
&\cong 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H_I(t_0, t') dt' \\
&\quad + \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} H_I(t_0, t') H(t_0, t'') dt'' + \dots
\end{aligned} \tag{5.3.13}$$

olur [40]. Bu açılım Dyson serisi olarak bilinir. Böylece;

$$c_n = c_n^{(0)} + c_n^{(1)} + c_n^{(2)} + \dots \tag{5.3.14}$$

olur ve yukarıda tanımlanan dyson serilerinin c_n terimleri aşağıdaki gibi tanımlanır.

$$\begin{aligned}
c_n^{(0)}(t) &= \delta_{in} \quad , \\
c_n^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle n | H_I(t_0, t') | i \rangle dt' \quad , \\
c_n^{(2)}(t) &= \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} \langle n | H_I(t_0, t') H_I(t_0, t'') | i \rangle dt'' \quad .
\end{aligned} \tag{5.3.15}$$

Bu açılım basit bir şekilde;

$$\begin{aligned}
c_n^{(0)}(t) &= \delta_{in} \quad , \\
c_n^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \exp[i\omega_{ni}(t' - t_0)] H_{ni}(t') dt' \quad , \\
c_n^{(2)}(t) &= \left(\frac{-i}{\hbar} \right)^2 \sum_m \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \exp[i\omega_{nm}(t' - t_0)] \\
&\quad \times H_{nm}(t') \exp[i\omega_{mi}(t'' - t_0)] H_{mi}(t'') \quad ,
\end{aligned} \tag{5.3.16}$$

yazılabilir [40] ki burada

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \tag{5.3.17}$$

ve

$$H_{nm}(t) = \langle n | H_I(t) | m \rangle \quad (5.3.18)$$

olarak ifade edilir. i ve n durumları arasındaki geçiş olasılığı basit bir şekilde aşağıdaki gibidir.

$$P_{i \rightarrow n}(t_0, t) = \left| c_n^{(0)} + c_n^{(1)} + c_n^{(2)} + \dots \right|^2. \quad (5.3.19)$$

Yukarıdaki analize göre, sıfırıncı düzeyde $|i\rangle$ ve $|n\rangle$ seviyeleri arasındaki geçiş olasılığı yoktur (tedirginlik olmadığında). 1. düzeyde geçiş olasılığı $\langle n | H_I | i \rangle$, matris elemanlarının zamana bağlı integral oranıdır. Böylece matris elemanı sıfırsa ilk düzeyde $|i\rangle$ ve $|n\rangle$ seviyeleri arasında geçiş olasılığı yoktur. Ancak 2. düzeyde $|i\rangle$ ve $|n\rangle$ seviyeleri arasındaki geçiş $\langle n | H_I | i \rangle$ matris elemanları mümkün olduğu durumda sıfırdır.

5.4 GÜÇLÜ ALAN YAKLAŞIKLIĞINDA ZAMANA BAĞLI DİPOL ETKİ

Güçlü alan yaklaşımı (SFA) ve onun uzantıları lazer molekül etkileşiminde ve kuvvetli lazer-atom alanında teorik olarak çalışılmıştır [41]. Schrödinger denkleminin sonuç veren Hamiltonyen $H = \bar{H}_0 + \bar{H}_i$ olarak yazılır. Lazer alanın etkisinde bağlanma durumu ihmal edilirse, SFA yaklaşımı çözülebilir. Sonra, zaman-gelişim işlemcileri için Dyson denklemleri kullanılır.

ATI için M_p 'in genliği:

$$M_p(t_f, t_i) = \langle \Psi_p(t_f) | \hat{U}(t_f, t_i) | \Psi_0(t_i) \rangle \quad (5.4.1)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $U(t_f, t_i)$ zaman-gelişim işlemcisidir. Yani $U(t, t') = U^+(t', t)$ zamana bağlı Schrödinger denkleminin bilinen zaman gelişim işlemcisidir. $|\Psi_{\bar{p}}(t_f)\rangle$ saçılma durumu ve $|\Psi_0(t_i)\rangle$ bağlanma durumu olarak tanımlanır. $|\Psi_{\bar{p}}(t_f)\rangle$ saçılma durumundaki \bar{p} atomdan daha uzak olan asimtotik momentum olduğundan t_f zamanında elektronu bulmak için $\omega_{i \rightarrow f} = |M_p(t_f, t_i)|^2$ olasılığını gösterir. Elektron $I_p < 0$ enerjili ve $|\Psi_0(t_i)\rangle$ taban durumunda ise t_i zamanı gösterir. \hat{H}_0 tedirginmemiş atomu tanımlar ve seçilen ayar

$\hat{H}_0 = \hat{H}'_0$ bağılı değildir. Volkov –Hamiltonyeni $\hat{H}^{(v)}(t)$ lazer alanında elektronun serbest hareketini gösterir. Böylece hamiltonyen

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi^{(v)}(t)\rangle = \hat{H}^{(v)}(t) |\Psi^{(v)}(t)\rangle = \left[\frac{\hat{p}^2}{2} + H_{\text{him}}^L + \bar{H}_i \right] |\Psi^{(v)}(t)\rangle \quad (5.4.2)$$

olur. Volkov –Hamiltonyeni dipol yaklaşımından dolayı momentum uzayında köşegendir ve elde edilen volkov dalga fonksiyonu

$$|\Psi_{\vec{p}}^{(v)}(t)\rangle = |\vec{p}(t)\rangle \exp\left(i \int_t^\infty dt' \varepsilon(\vec{p}(t'))\right) \quad (5.4.3)$$

olarak gösterilir. Burada $|p\rangle$ momentum özdeğeridir. Burada kinetik enerji

$\varepsilon(\vec{p}) = \frac{p^2}{2} - \frac{p^4}{8c^2}$ görelî kütle değişimini ve kinetik momentumu $\vec{p}(t) = \vec{p} + \frac{\vec{A}(t)}{c} + \vec{T}(p_x, t)$ ile

$\vec{T}(p_x, t) = e_z \left[p_x \frac{A(t)}{c^2} + \frac{A(t)^2}{2c^3} \right]$ olarak tanımlanır [35].

SFA geçiş matrisini elde etmek için zaman gelişim işlemcisi $\hat{U}(t, t')$ denklem (5.4.2)'de zamana bağılı Schrödinger dalga denkleminde kullanıldığında

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t') = [\bar{H}_0 + \bar{H}_i(t)] \hat{U}(t, t') \quad (5.4.4)$$

olur. Zaman gelişim işlemcisine uygun olan integral denklemi

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t') &= \hat{U}_0(t, t') - i \int_{t'}^t dt'' \hat{U}(t, t'') \bar{H}_i(t'') \hat{U}_0(t'', t') \\ &= \hat{U}_0(t, t') - i \int_{t'}^t dt'' \hat{U}_0(t, t'') \bar{H}_i(t'') \hat{U}(t'', t') \end{aligned} \quad (5.4.5)$$

şeklindedir [39,41,42]. Burada $\hat{U}_0(t, t')$ sadece \hat{H}_0 ile zamana bağılı Schrödinger denkleminde uygulanan gelişim işlemcisidir. Denklem (5.4.1)'deki matris elemanına denklem (5.4.5)'in yazılması sonucu

$$M_p(t_f, t_i) = -i \int_{t_i}^{t_f} dt' \langle \Psi_p(t_f) | \hat{U}(t_f, t') \bar{H}_I(t') | \Psi_0(t') \rangle \quad (5.4.6)$$

şeklinde olur. Burada $\langle \Psi_p(t_f) | \hat{U}_0(t_f, t_i) | \Psi_0(t_i) \rangle = \langle \Psi_p(t_f) | \Psi_0(t_f) \rangle = 0$ olarak kullanılır çünkü $|\Psi_p(t_f)\rangle$ saçılma durumu $|\Psi_0(t_f)\rangle$ bağlanma durumuna dik ve $\hat{U}_0(t', t_i) | \Psi_0(t_i) \rangle = |\Psi_0(t')\rangle$ olmaktadır. Böylece $\hat{U}(t, t')$ zaman gelişim işlemcisinin integral denklemi

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t') &= \hat{U}^{(V)}(t, t') - i \int_{t'}^t dt'' \hat{U}^{(V)}(t, t'') \hat{V} \hat{U}^{(V)}(t'', t') \\ &= \hat{U}^{(V)}(t, t') - i \int_{t'}^t dt'' \hat{U}^{(V)}(t, t'') \hat{V} \hat{U}^{(V)}(t'', t') \end{aligned} \quad (5.4.7)$$

olarak yazılır. Yukarıdaki denklemde gelişim işlemcisi $\hat{U}^{(V)}(t, t')$ denklem (5.4.2)'deki zamana bağlı Schrödinger denklemine uygun olur. Denklem (5.4.7), denklem (5.4.6)'da yerine yazılırsa

$$\begin{aligned} M_p(t_f, t_i) &= -i \int_{t_i}^{t_f} dt' \langle \Psi_p(t_f) | \hat{U}^{(V)}(t_f, t') \bar{H}_I(t') | \Psi_0(t') \rangle \\ &\quad - i \int_{t_i}^{t_f} dt'' \int_{t''}^{t_f} dt' \langle \Psi_p(t_f) | \hat{U}^{(V)}(t_f, t') \hat{V} \hat{U}^{(V)}(t', t'') \bar{H}_I(t'') | \Psi_0(t'') \rangle \end{aligned} \quad (5.4.8)$$

sonucu elde edilir. Denklem (5.4.8)'de $\int_{t_i}^{t_f} dt'' \int_{t''}^{t_f} dt' = \int_{t_i}^{t_f} dt' \int_{t_i}^{t'} dt'' \theta(t' - t'') = \int_{t_i}^{t_f} dt' \int_{t_i}^{t'} dt''$ ifadeleri kullanılarak denklem yeniden hesap edilirse

$$M_p(t_f, t_i) = -i \int_{t_i}^{t_f} dt' \langle \Psi_p(t_f) | \hat{U}^{(V)}(t_f, t') \left[\begin{array}{l} \bar{H}_I(t') | \Psi_0(t') \rangle \\ -i \int_{t'}^{t_f} dt'' \hat{V} \hat{U}^{(V)}(t', t'') \bar{H}_I(t'') | \Psi_0(t'') \rangle \end{array} \right] \quad (5.4.9)$$

şeklinde olur. Denklem (5.4.9)'da ikinci terim ihmal edilir ve elde edilen denklem

$$M_p(t_f, t_i) = -i \int_{t_i}^{t_f} dt \langle \Psi_p^{(V)}(t) | \bar{H}_I(t) | \Psi_0(t) \rangle \quad (5.4.10)$$

olur. Burada SFA veya *Keldysh genliđi* denir. Hız ayarında Volkov dalga fonksiyonu $|\Psi^{(v)}(t)\rangle = \hat{U}^{(v)}(t, t')|p\rangle$ şeklinde tanımlanır. SFA da geçiş iyonlaşma zamanı t ile tanımlanır ve burada bağlanma durumundan $|\Psi_0(t)\rangle$ lazer alanı $\bar{H}(t)$ ile etkileşimlerinden dolayı volkov durumu $|\Psi_p^{(v)}(t)\rangle$ ye kadar geçiş vardır. Denklem (5.4.10)'da $\bar{H}(t)$ yerine $\hat{V}(\vec{r})$ yerleşmesi sonucu

$$\begin{aligned}
M_p(t_f, t_i) &= -i \int_{t_i}^{t_f} dt \langle \Psi_p^{(v)}(t) | \hat{H}^{(v)} - \bar{H}_0 + \hat{V} | \Psi_0(t) \rangle \\
&= -i \int_{t_i}^{t_f} dt \langle \Psi_p^{(v)}(t) | -i\vec{\partial}_t + \hat{V} - i\vec{\partial}_t | \Psi_0(t) \rangle \\
&= -\int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \partial_t \langle \Psi_p^{(v)}(t) | \Psi_0(t) \rangle + i \langle \Psi_p^{(v)}(t) | \hat{V} | \Psi_0(t) \rangle \right\} \\
&= -\langle \Psi_p^{(v)}(t) | \Psi_0(t) \rangle \Big|_{t_i}^{t_f} - i \int_{t_i}^{t_f} dt \langle \Psi_p^{(v)}(t) | \hat{V} | \Psi_0(t) \rangle
\end{aligned} \tag{5.4.11}$$

şeklinde elde edilir. t_i ve t_f zamanları lazerin yok olmasından dolayı ilk terim t_i ve t_f zamanlarında Fourier dönüşümünün ilk durumundan farklıdır. Sınır terimleri dik olmayan düzlem dalga ve ilk bağlanma durumundan dolayı gösterilir. Bununla beraber asimtotik oran hesaplandığında ilk terimlerin katkısı sıfır olur. Bu nedenle denklem (5.4.10) daki SFA genliđi

$$M_p(t_f, t_i) = -i \int_{t_i}^{t_f} dt \langle \Psi_p^{(v)}(t) | \hat{V}(\vec{r}) | \Psi_0(t) \rangle \tag{5.4.12}$$

şeklinde yazılabilir. $V(\vec{r})$ bağlayıcı potansiyel iyonlaşma aracı olarak görülür. Ayrıca denklem (5.4.10)'daki $\bar{H}(t)$ ve $\hat{V}(\vec{r})$ terimleri eşit olarak davranır.

Denklem (5.4.9)'daki matris elemanına geri dönülürse ve burada ki $\hat{U}(t', t)$ zaman gelişim işlemeçisi yerine $\hat{U}^{(v)}(t, t')$ olarak yazılırsa SFA geçiş matris elemanı

$$M_p^{(SFA)}(t_f, t_i) = M_p^{(SFA, dir)}(t_f, t_i) + M_p^{(SFA, resc)}(t_f, t_i) \tag{5.4.13}$$

$$M_p^{(SFA,dir)}(t_f, t_i) = M_p^{(SFA)}(t_f, t_i) = -i \int_{t_i}^{t_f} dt \langle \Psi_p^{(V)}(t) | \bar{H}_i(t) | \Psi_0(t) \rangle, \quad (5.4.14)$$

$$M_p^{(SFA, resc)}(t_f, t_i) = - \int_{t_i}^{t_f} dt' \int_{t_i}^{t'} dt'' \langle \Psi_p^{(V)}(t') | \hat{V} \hat{U}^{(V)}(t', t'') \bar{H}_i(t'') | \Psi_0(t'') \rangle \quad (5.4.15)$$

olarak yazılır. Denklem de $t_i = -\infty$ ve $t_f = \infty$ olarak yazılabilir ve Böylece (5.4.14) ve (5.4.15) denklemleri yeniden biçimlendirilebilir. Yani

$$M_p^{(SFA,dir)} = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \Psi_p^{(V)}(t) | \bar{H}_i(t) | \Psi_0(t) \rangle, \quad (5.4.16)$$

$$M_p^{(SFA, resc)} = - \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \langle \Psi_p^{(V)}(t') | \hat{V} \hat{U}^{(V)}(t', t'') \bar{H}_i(t'') | \Psi_0(t'') \rangle \quad (5.4.17)$$

şeklinde elde edilir. Elektronun son bulunduğu volkov durumunda $|\Psi_{\vec{p}}^{(V)}\rangle$ tekrar saçılma olayı dedektörde \vec{p} momentumuna varılacağını ifade eder. Yukarıdaki denklemde bağlanma durumu için $\Psi_0(\vec{p}, t) = \langle \vec{p} | \Psi_0(t) \rangle$ ve $\Psi_0(\vec{p}, t) = \exp(I_p t) \Psi_0(\vec{p})$ olarak tanımlanır. I_p iyonlaşma potansiyelidir. Denklem (5.4.17)'de saçılma durumu ve bağlanma durumları yerlerine yazılır. Ayrıca volkov zaman-gelişim işlemcisi

$$U_f(t', t'') = \int d^3 \vec{w} |\Psi_{\vec{w}}^{(V)}(t')\rangle \langle \Psi_{\vec{w}}^{(V)}(t'')| \quad (5.4.18)$$

şeklinde gösterilir.

Uzunluk ayar dönüşümünde matris elemanı

$$M_p^{(SFA, resc)} = - \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \int d^3 \vec{w} e^{iS_p(t)} \left\langle \vec{p} + \frac{\vec{A}(t)}{c} + \vec{T}(p_x, t) \left| \hat{V} \left| \vec{w} + \frac{\vec{A}(t)}{c} + \vec{T}(w_x, t) \right. \right. \right\rangle \quad (5.4.19)$$

$$\times e^{-iS_w(t)} \left\langle \vec{w} + \frac{\vec{A}(t)}{c} + \vec{T}(w_x, t) \left| \bar{H}_i(t'') \right| \Psi_0 \right\rangle e^{iS_w(t)}$$

olarak yazılır. Yukarıdaki integralde $\vec{w}(t) = \vec{w} + \frac{\vec{A}(t)}{c} + \vec{T}(w_x, t)$, $M(\vec{p}, t) \langle \vec{p} | \vec{H}_i(t) | 0 \rangle$ ve $\tilde{V}(\vec{p}, \vec{w}) = \langle \vec{p} | V(\vec{r}) | \vec{w} \rangle$; $-I_p$ enerjili atomik taban durumu $|\vec{w}\rangle$ ve $|0\rangle$ olan momentum özdeğerine sahip atomik potansiyelin fourier dönüşümü olacak şekilde seçilirler. Böylece tekrar saçılma ile ATI nin genliği

$$M_p^{(SFA; resc)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \vec{w} [M(\vec{w}(t''), (t'')) \times \tilde{V}(\vec{p}(t'), \vec{w}(t')) \exp[-i[S(\vec{w}, t', t'') + S(\vec{p}, t, t')]]] \quad (5.4.20)$$

olur. Elektronik dalga fonksiyonu salınım sırasında t zamanına kadar elde edilen faz çarpanına $\exp(-iS(\vec{p}, t, t'))$ denir. Yarı-klasik hareket denklemi $S(\vec{p}, t, t')$;

$$S(\vec{p}, t, t') = \int_t^{\infty} dt' \varepsilon(\vec{p}(t')) + I_p \quad (5.4.21)$$

şeklinde tanımlanır. Burada, atomik potansiyelin etkisi t ve t' arasında çok küçük olduğu düşünülürse $(-iS(\vec{p}, t, t'))$ sabit bir momentum ile lazer alanında elektronun serbestçe hareket edebilme yeteneğini tanımlayan bir harekettir; ancak, $(-iS(\vec{p}, t, t'))$ ' nin tamamen bağlı seviyelerin potansiyeli olan I_p 'e bağlı olduğunu unutmamak gerekir. Dalga boyunun uzun olduğu yerde $(U_p > I_p > \omega)$ denklem (5.4.20)'de beş katlı integral "saddle point metodu" ile çözülebilir.

5.4.1 UZUNLUK AYAR DÖNÜŞÜMÜNDE SADDLE POINT METOT

Bu bölümde "saddle point metot" yöntemi kullanılmaktadır. Bu yöntem tezin sonundaki ekler kısmında değinilmiştir. Bu yöntemde denklem (5.4.20) eşitliği kullanılarak asimtotik davranış sergileyen fonksiyonlar genel bir metotta yazılır. Bu metod $i \in \{\vec{w}, t', t''\}$ bağlı olmak üzere [E1.6]'daki koşul gereği

$$\partial_i [S(\vec{w}, \vec{t}', \vec{t}'') + S(p, t, \vec{t}')] = 0 \quad (5.4.22)$$

şartını sağlamasını gerektirir. “Saddle-point metod” için denklem (5.4.22)’nin \tilde{w} ’ye göre türevinden

$$\tilde{w} = -\frac{\int_{\tilde{t}'}^{\tilde{t}''} d\tau [A(\tau)/c + T(\tilde{w}_x, \tau)]}{\tilde{t}' - \tilde{t}''} \quad (5.4.23)$$

iyonlaşan elektronun sürüklenme momentumu bulunur. İyonlaşma sürecinde enerji korunumu denklem (5.4.22)’nin \tilde{t}' ve \tilde{t}'' ’ye göre türevinden bulunabilir. Bu koşullar altında denklem (5.4.22)’nin \tilde{t}'' ’ye göre türevinden

$$\left[\varepsilon(\tilde{w}(\tilde{t}')) + I_p \right] \frac{d\tilde{t}'}{d\tilde{t}''} - \left[\varepsilon(\tilde{w}(\tilde{t}'')) + I_p \right] \frac{d\tilde{t}''}{d\tilde{t}''} = 0 \quad (5.4.24)$$

elde edilir. $\frac{d\tilde{t}'}{d\tilde{t}''} = 0$ ve $\frac{d\tilde{t}''}{d\tilde{t}''} = 1$ eşitliğinden

$$\varepsilon(\tilde{w}(\tilde{t}'')) + I_p = 0 \quad (5.4.25)$$

haline dönüşür buradan da

$$\varepsilon(\tilde{w}(\tilde{t}'')) = -I_p \quad (5.4.26)$$

elde edilir. İyonlaşma sürecinde enerji korunumu için ise denklem (5.4.22)’nin \tilde{t}' ’ne göre türevinden

$$\frac{d}{d\tilde{t}'} [S(\tilde{w}, \tilde{t}', \tilde{t}'') + S(\tilde{p}, t, \tilde{t}')] = 0 \quad (5.4.27)$$

olur. Bu denklemi açık bir şekilde ifade edilirse

$$\left[\varepsilon(\tilde{w}(\tilde{t}')) + I_p \right] \frac{d\tilde{t}'}{d\tilde{t}'} - \left[\varepsilon(\tilde{w}(\tilde{t}'')) + I_p \right] \frac{d\tilde{t}''}{d\tilde{t}'} + \left[\varepsilon(\tilde{p}(t)) + I_p \right] \frac{dt}{d\tilde{t}'} - \left[\varepsilon(\tilde{p}(\tilde{t}')) + I_p \right] \frac{d\tilde{t}'}{d\tilde{t}'} = 0 \quad (5.4.28)$$

şekline dönüşür. Buradanda $\frac{d\tilde{t}''}{d\tilde{t}'} = 0$ ve $\frac{d\tilde{t}'}{d\tilde{t}'} = 1$ bağıntıları kullanılırsa

$$\varepsilon(\tilde{w}(\tilde{t}')) - \varepsilon(\tilde{p}(\tilde{t}')) = 0 \quad (5.4.29)$$

denklemini elde edilir ve

$$\varepsilon(\tilde{w}(\tilde{t}')) = \varepsilon(\tilde{p}(\tilde{t}')) \quad (5.4.30)$$

iyonlaşma sürecinde enerji korunumu elde edilmiş olur. Böylece tekrar saçılma sürecinde $\tilde{w}(t) = \tilde{w} + \frac{\tilde{A}(t)}{c} + \tilde{T}(\tilde{w}_x, t)$ enerji korunur. \tilde{t}'' ve \tilde{t}' iyonlaşma ve tekrar saçılma zamanına uyar. Denklem (5.4.23)'te ikinci mertebede $1/c$ terimi sayısal bir hesapla ihmal edilmektedir. Böylece denklem (5.4.23) ve denklem (5.4.30) çözümleri kullanılarak tekrar saçılma genliği [35],

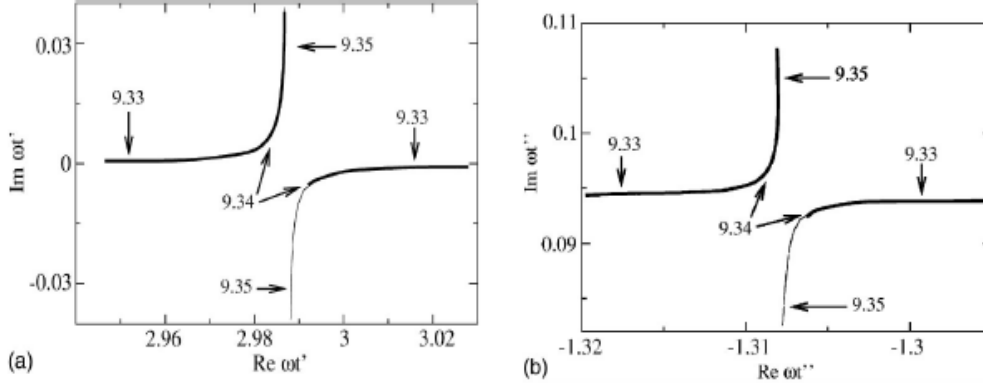
$$M_p = \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_{SP} \left(\frac{(2\pi)^5}{\det(\partial_{ij} S(\tilde{w}, \tilde{t}', \tilde{t}'') + \partial_{ij} S(\tilde{p}, t, \tilde{t}'))} \right)^{1/2} \times \tilde{V}(\tilde{p}(\tilde{t}'), \tilde{w}(\tilde{t}')) M(\tilde{w}(\tilde{t}''), \tilde{t}'') \quad (5.4.31)$$

$$\times \exp\left\{-i\left[S(\tilde{w}, \tilde{t}', \tilde{t}'') + S(\tilde{p}, t, \tilde{t}')\right]\right\}$$

olarak yazılabilir.

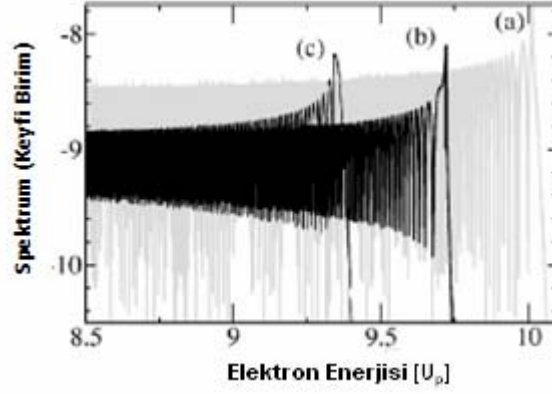
$|M_p|^2$ sabit faktöründen başka fotoelektron spektrumuna eşittir. Denklem (5.4.23) ve denklem (5.4.30)'un fiziksel olarak uygun çözümlerinin altkümesini gösterir. Seçilen bölge için saddle pointin önemi klasik analiz [43] yoluyla belirlenen geri saçılma elektronlarıdır. İyonlaşan dalga paketinin yayılımından dolayı $\tilde{t}' - \tilde{t}'' < \frac{2\pi}{\omega}$ spektrumuna egemendir ve iyonlaşma elektronun çoklu dönüşümleri daima ihmal edilebilir [44]. Bundan başka adyabatik geçiş teorisine göre saddle point noktaları $S(\tilde{p}, t, \tilde{t}')$ ve $S(\tilde{w}, \tilde{t}', \tilde{t}'')$ fizikseldir [26]. Bu şartlar elektronun enerji spektrumunun seçilen bölgede iki farklı saddle point şartını verir. Son elektron enerjisinin bir fonksiyonu gibi \tilde{t}'' başlama zamanı ile \tilde{t}' dönüş zamanı karmaşık düzlem yolunu izler. Bu yoldaki enerji klasik seçime uygun kapalı yaklaşıma sahiptir. Bu

yollardan biri seçilen enerjiden daha yüksek elektron enerjisinde hareket eden hayali olarak pozitif kısmı verir.



Şekil 5.6.1 a) \tilde{t}^n tekrar saçılma zamanını gösterir. b) Denklem (5.4.23) ve denklem (5.4.30)'a göre \tilde{t}^n zamanı iyonlaşma zamanıdır. Şekildeki oklar U_p nin çokluğunda belirli olan son elektron enerjilerini gösterir. 9.34 U_p de seçilen enerji iki yolun birbirine yakın olduğu noktalarla verilir. Keskin çizgiler [44]'e göre belirlenen ince çizgiler boyunca yeniden gösterilen saddle point noktalarının olduğu denklem (5.4.31) yolu ile spektrum hesabında kullanılan saddle point noktalarını tanımlar.

Yapılan son çalışmalarda atom-güçlü alan etkileşiminde foton salınmasıyla [45] lazer alanının manyetik alan bileşen etkisinin dipol yaklaşıklılığı için yeterince küçük fakat görelî tanım için yeterince büyük olmadığından “dipol olmayan” bu durum kuramsal hesaplamalarda önem kazanmaktadır. Denklem (5.4.31)'deki üslü terimin içindeki magnetik alandan dolayı yapılan düzeltmeler denklem (5.4.20) denklemden daha hasas hale getirir. Bu sebeple $1/c$ mertebesindeki terimi ihmal edilir. Matris elemanlarını hesaplamak için ayrılabilen kısa alanlı potansiyel ile Lewenstein's atom modeli kullanılır.



Şekil 5.6.2 Lazer alanında fotoelektron tayfında açılal frekans $\omega = 0.05$ a.u. ve güçlü elektrik kuvveti $E = 1.22$ a.u. $\log(|Mp|^2)$ ile denklem (5.4.31)'de son elektron momentumuyla lazer kutuplanma yönü $p = (p, 0, 0)$. Elektron enerjisinde U_p :a) dipol yaklaşım b) manyetik alan düzeltmeleri c) manyetik alan düzeltmeleriyle ve görelil kütle değışimidir [35].

Şekil 5.6.2 kutuplanma doğrultusunda yayılan elektron enerji tayfi dipol yaklaşıklığının içirilmesi durumları için karşılaştırılır ve bu tayf yukarıdaki (5.4.31) denkleminde $1/c$ de birinci ve ikinci mertbe değirliliğini içirir.

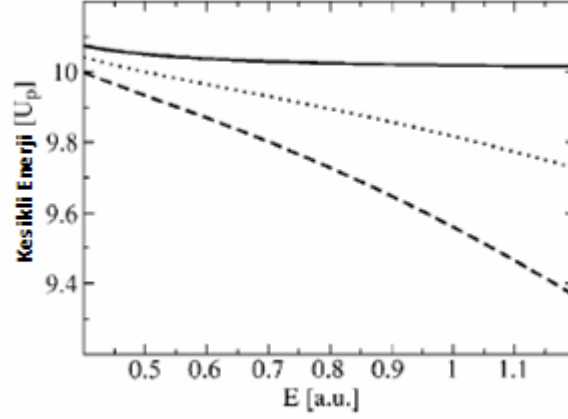
Fotoelektron spektrumları arasında tanımlanan dipol olmayan etkiler ve görelil etkiler olmadan analitiksel bir tahmin için saddle-point metot şartları için uygun denklemler olan (5.4.23) ve (5.4.30) denklemleri $1/c$ genişletilmesi ile çözüür. Böylece sıfırıncı mertbenin çözüümü klasik saddle point (w_0, t'_0, t''_0) şeklindedir. Klasik iyonlaşma zamanı t''_0 için ilk mertbe değiri karmaşıktır ve iyonlaşma genliğı M_p de üstel bir D “Damping faktörü”nün oluşumu için

$$D = \exp\left(-\frac{[2I_p + \tilde{w}_z(t''_0)^2]^{3/2}}{3|E(t''_0)|}\right) \quad (5.4.32)$$

gereklidir. “Damping faktörü” zayıf görelil alanda yüksek mertbede harmonik üretim (HOHG) için verilir [35]. $\omega t'_0 \approx 2.9$ ve $\omega t''_0 \approx -1.3$ [35] kullanımıyla denklem (5.4.32)'de

düzeltilmeleri ölçmek mümkün olabilir. $\tilde{w}_z(t''_0)^2 \approx 0.7 \frac{U_p^2}{c^2}$ elde edilebilir ki bu magnetik

alandan dolayı elektronun sürüklenmesini gösterir. “Damping faktörü”nde görelî kütle değişimi için $\frac{1}{c}$ ’den daha yüksek mertebeler ihmal edilebilir.



Şekil 5.6.3 Lazer alanında fotoelektron tayfında açısal frekans $\omega = 0.05$ a.u. kesik enerjinin sınır noktasıdır. Kalın çizgi: dipol yaklaşım, noktalı çizgi: manyetik alan düzeltmeleri, kesikli çizgi: manyetik alan düzeltmeleri ve görelî kütle değişimidir [35].

Şekil 5.6.3’te elektrik alan kuvvetinin bağımlılığı kutuplanma yönünde son momentumla elektronların sınır noktası kesik enerjide gösterilir. Manyetik alan hareketinde denklem (5.4.21)’de ikinci mertebedeki $1/c$ kutuplanma yönünde son elektron momentumu için rol oynar, kesikli bölgeyi tanımlamak için kesinlikle görelî kütle değişimine ihtiyaç vardır.

Düzlüklerin sonundaki kesinti noktasında lazer şiddeti ani bir şekilde azalır ve kesinti noktasındaki atımlar, lazer alanı tarafından üretilen elektronun en yüksek enerji değerini tayin eder. Dolayısıyla atımların şekli ve frekansı, lazer alanının şiddetine bağılı olduğu gibi bu kesinti noktasının durumuna da bağılıdır. Eşik üzeri iyonlaşmada bu düzlükler ve kesinti noktaları, birçok güçlü alan olgusu için yapılan hesaplamalar kuantum ve klasik görüşü birleştirici bir model niteliği taşır. Kesinti noktasının yeri en yüksek frekans durumunda olması söz konusudur. Bu nokta düzlük bitiminde oluşmaktadır. Bu düzlükte lazer alanı tarafından üretilen elektron enerjisi çok yüksektir.

SONUÇ

Tezde, güçlü lazer alanı ile bir elektronlu atomik sistemlerin etkileşmesinde oluşacak iyonlaşma süreçleri teorik bir alt yapıda verildi. Bunu anlayabilmek için önce bir elektronlu atomik sistemin elektromanyetik alan ile etkileşme sırasında olası süreçlerin neler olduğu tanımlandı. Lazer alanında oluşan etkileşme sadece bir tek foton değil, çoklufoton iyonlaşması (MPI) ve eşik üzeri iyonlaşma (ATI) süreçlerinin ne olduğu ve nasıl gerçekleştiği anlatıldı. Sonra dipol yaklaşımında iyonlaşma, MPI süreci tartışıldı. Yüksek yoğunluklu lazer alanında iyonlaşma süreci, özellikle de ATI için dipol olmayan etkiler incelendi. Bunu da 1979 yılında Agostini ve *çalışma arkadaşlarının* eşik üzeri iyonlaşmanın güçlü alan yaklaşımında görelilik etkileriyle genelleştirilmiştir. Son on yılda eşik üzeri iyonlaşmanın araştırılması ATI' in, üç basamak modeli yoluyla görelilik olmayan bölgede teorik yorumlarla ve kuantum yörünge yaklaşımı ile güçlü alan yaklaşımının (SFA) teorik yorumları yapılmaktadır. Yapılan son çalışmalarda atom-güçlü alan etkileşiminde foton salınmasıyla lazer alanının manyetik alan bileşen etkisinin, dipol yaklaşıklık için yeterince küçük, fakat görelilik tanım için yeterince büyük olmadığından dipol olmayan bu durum kuramsal hesaplamalarda önem kazanmaktadır.

Eşik üzeri iyonlaşmanın analitiksel teorisinin genellemesi için, dipol olmayan ve görelilik düzeltmeler hesap edilmektedir. Dipol yaklaşıklık, dipol olmayan ve görelilik etkilerin hesaplamaları karşılaştırıldığında yüksek foton enerjisinde atmaların şekli ve frekansı, lazer alanının şiddetine bağlı olduğu gibi kesinti noktasının durumuna da bağlıdır. Bu etkinin sebebi, elektronun tekrar salınım yönünde sürüklenmesidir. Bu etkinin sebebi, elektronun tekrar salınım yönünde sürüklenmesidir. Özellikle görelilik düzeltmeler düzlük ve karakteristik bir sınır noktasına dayanan fotoelektron tayfinin yüksek enerji parçasında yer alır. Manyetik bileşende lazer alanının düzlük yüksekliğinin azalışı, sınır noktası enerjisinin artışı ve lazer alanının çoğalma yönünde yayılan elektronların sürüklenmesini verdiği için dolayı düzeltmeler yapılır.

Eşik üzeri iyonlaşmanın (ATI), görelilik bölgede daha fazla teorik araştırma için güçlü alan yaklaşımı (SFA) görelilik teoride formüle edilir. Eşik üzeri iyonlaşma (ATI), “foton iyonlaşması” olarak bilinen güçlü elektromanyetik alanlarda meydana gelen bir süreçtir. Bu MPI sürecinde, kinetik enerjinin $\hbar\omega$ biriminde ortaya çıkar, minimum sayının, atom veya molekülün bağlayıcı enerjisini sağlamayı gerektirdiğinden dolayı elektromanyetik alanda daha çok foton soğurur. Atomların çoğu normal olarak taban durumlarında olduklarından, kendiliğinden ışımaya yapmak için soğurma, uyarılmayla yayınlama yapmaktan çok daha

olasıdır. Atomların çok büyük kısmı, alt durumları boş bırakılarak daha yüksek uyarılmış duruma çıkarsa nüfus terslenmesi olmaktadır.

Bu çalışmada oldukça yüksek yoğunlukta ($5 \times 10^{16} Wcm^{-2}$)'den büyük lazer alanında bir atomik sistemin eşik üzeri iyonlaşmasının görelî düzeltmelerini önemli ölçüde değiştiren yöntemlere ve dipol olayan etkilere değinildi. Burada iki özellik önemli rol oynar. Birinci özellik iyonlaşan elektronun manyetik bölgede sürüklenmesine bağlıdır. İkinci özellik ise görelî kütle değişimi ile ilgilidir. Görelilik eşik üzeri iyonlaşma için elektron enerji tayfında kesinti noktasının az bir biçimde artışı ve düz bölgenin azalışı ile değerlendirilir.

EKLER

1.SADDLE POINT METOD

Bu kısımda, fiziksel matematiğin de bir problemi olan ve asimtotik davranış sergileyen fonksiyonların bir bölümü olan “saddle point metot” ile integral çözümü tanımlanacaktır. Asimtotik davranış sergileyen bu fonksiyonların genel şekli,

$$I(s) = \int_c g(z) \exp(sf(z)) dz \quad (E1.1)$$

dir. Burada, z karmaşık olmak üzere $g(z)$ ve $f(z)$ analitik karmaşık fonksiyonlar olarak tanımlanır. s gerçel olmak üzere c üzerinden alınan integralde $g(z)$ integral faktörü, üstel bölgede baskındır. $f(z)$ ise

$$f(z) = u(x, y) + iv(x, y) \quad (E1.2)$$

şeklinde tanımlıdır. Dolayısıyla denklem (E1.1)' de yazılan integral,

$$I(s) = \int_c g(z) \exp(su(x, y)) \exp(siv(x, y)) dz \quad (E1.3)$$

şeklini alır. Eğer sanal kısım bölgede sabit ise, gerçel kısım maksimum durumdadır ve $v(x, y) = v(x_0, y_0) = v_0$ şeklinde bir yaklaşım yapılabilir. Bu durumda, yukarıdaki integral,

$$I(s) \approx \exp(siv_0) \int_c g(z) \exp(su(x, y)) dz \quad (E1.4)$$

şeklinde yazılmış olur. $sf(z)$ kısmın maksimum olduğu durumda $f(z)$ ' nin gerçel kısmı $u(x, y)$ de maksimumdur. Dolayısıyla,

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} = 0 \quad (E1.5)$$

şeklinde maksimum nokta Cauchy Reiman koşulu [46] ile belirlenir:

$$\frac{\partial f(z)}{\partial z} = 0 \quad (\text{E1.6})$$

Böylece, seçilen $u(x, y)$ ve sanal kısmı, $v(x, y)$ 'nin sabit olduğu bu koşullar altındaki noktaya saddle point maksimum nokta olarak tanımlanır. Bu tür fonksiyonların çözümü için önce saddle point noktası bulunur. Daha sonra bu fonksiyonlar seriye açılarak integralin içi gaussiyen formda düzeltilip integralin alınması kolaylaştırılır. Bu koşullar altında saddle point fonksiyonu olarak tanımlanan $f(z)$ Taylor serisine açılırsa:

$$f(z) = f(z_0) + \frac{1}{2}(z - z_0)^2 f''(z_0) + \dots \quad (\text{E1.7})$$

olur. Yukarıdaki denklemde, denklem (E1.6) Cauchy Reiman koşulundan dolayı birinci dereceden türev yoktur. Bu durumda, denklem (E1.7) tekrar düzenlenecek olursa,

$$f(z) - f(z_0) \approx \frac{1}{2}(z - z_0)^2 f''(z_0) = -\frac{1}{2s} t^2 \quad (\text{E1.8})$$

yazılır. Bu eşitliği t değeriyle tanımlanmıştır. Eğer $(z - z_0)$ 'ı kutupsal formda yazılırsa,

$$(z - z_0) = \delta e^{i\alpha} \quad (\text{E1.9})$$

t 'yi

$$t^2 = -sf''(z_0)\delta^2 e^{2i\alpha} \quad (\text{E1.10})$$

$$t = \pm \delta |sf''(z_0)|^{1/2} \quad (\text{E1.12})$$

şeklinde elde edilir. Tanımlanan t parametresi ve denklem (E1.7) kullanarak, denklem (E1.8)'de tekrar yazılırsa:

$$I(s) \approx \exp(sf(z_0))g(z_0) \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-t^2/2) \frac{dz}{dt} dt \quad (\text{E1.13})$$

olur. Burada,

$$\frac{dz}{dt} = \left(\frac{dt}{dz} \right)^{-1} = \left(\frac{dt}{d\delta} \frac{d\delta}{dz} \right)^{-1} = |sf''(z_0)|^{1/2} e^{i\alpha} \quad (\text{E1.14})$$

dir. Bu durumda, denklem (E1.13) tekrar yazılırsa,

$$I(s) \approx \frac{g(z_0)e^{sf(z_0)}e^{i\alpha}}{|sf''(z_0)|^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-t^2/2) dt \quad (\text{E1.15})$$

olarak bulunur. Bu denklemde, Gauss integral alma özelliği kullanılarak yukarıdaki integralin sonucu,

$$I(s) \approx \frac{\sqrt{2\pi} g(z_0) e^{sf(z_0)} e^{i\alpha}}{|sf''(z_0)|^{1/2}} \quad (\text{E1.16})$$

şeklindedir.

KAYNAKLAR

- [1] A.L Huillier, Europhysics **33** (2002), 6.
- [2] Thomas David Nichols, *Measurement of Intensity-Dependent Rates of Above Threshold Ionization(ATI)*. LA-12060-T Thesis (1991).
- [3] B.H.Bransden and C.J.Joachain, Prof.Dr. Fevzi Köksal, Yrd.Doç.Dr.Hasan Gümüş *Atom ve Molekül Fiziği*. (1989).
- [4] Abdullah Verçin ve Tekin Dereli, *Kuantum Mekaniği 2*. (2000).
- [5] O. Hemmers, P. Glans, H. Wang, *Beyond the Dipole Approximation: Angular-Distribution Effects in N_2 1s Photoemission* (Department of Chemistry, University of Nevada, Lasvegas).
- [6] Lecompte C, Mainfray G, Manus C and Sanchez F 1975 Phys. Rev. Lett. **32** 265.
- [7] G. Mainfray G. Petite P. Agostini, F. Fabre and N. K. Rahman, *Free-free transitions following six-photon ionization of xenon atoms*. Phys.Rev. Lett. **42**(17) (1979), 1127.
- [8] Elena Gubbini, *Multiple Ionization of Heavy Atoms in Super Strong Laser Fields*. Doctora Philosophy (2005).
- [9] B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Introduction to quantum mechanics*. Longamn Scienti.c Technical (1992).
- [10] Ekaterina Eremina, *Electron correlation in multiple ionization of atoms and molecules by intense ultra-short laser pulses*. Doctora Philosophy (2005).
- [11] R. M. Potvliege and R. Shakeshaft, *Nonperturbative treatment of multiphoton ionization within the floquet framework. atoms in intense laser*. Academic press, New York, 1992.
- [12] R. B. Vrijen L. D. Noordam M. P. de Boer, J. H. Hoogenraad and H. G. Muller, *Indications of high-intensity adiabatic stabilisation in neon*. Phys. Rev. Lett. **71** (1993), 3263.

- [13] F. Fabre, G. Petite, P. Agostini, and M. Clement. J. Phys. B, **15** (1982),1353.
- [14] P. Kruit, J. Kimman, H.G. Muller, and M.J. Van der Wiel. Phys. Rev. A, **28** (1983), 248.
- [15] G. Petite, P. Agostini, and H.G. Muller. J. Phys. B, **21** (1988), 4097.
- [16] R.R. Freeman, P.H. Bucksbaum, H. Milchberg, S. Darack, D. Schumacher, and M.E. Geusic. Phys. Rev. Lett., **59** (1987),1092.
- [17] P. Hansch, M.A. Walker, and L.D. Woerkom. Phys. Rev. A, **55** (1997), R2535.
- [18] W. Becker, F. Grasbon, R. Kopold, D.B. Milosević, G.G. Paulus and H. Walther, *Above-Threshold Ionization: From Classical Features to Quantum Effects*. Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics, Vol. **48**.
- [19] Kuchiev, M. Y., 1987, JETP Lett., **45**, 404.
- [20] H. B. van Linden van den Heuvell and H. G Muller, *in multiphoton processes*, Cambridge University Press, New York, 1998.
- [21] P. B. Corkum, *Plasma perspective on strong-field multiphoton ionization*. Phys. Rev. Lett. **71** (1993), 13.
- [22] Kulander, K. C., Schafer, K. J., and Krause, J. L., *In Super-Intense Laser-Atom Physics*, Plenum Press, New York, 1993.
- [23] C. J. Joachain, N. J. Kylstra and R. M. Potvliege, *Atoms in intense, ultrashort laser pulses: non-dipole and relativistic effects*. journal of modern optics, 2003, vol. **50**.
- [24] H. R. Reiss, *Dipole-approximation magnetic fields in strong laser beams* . Phys. Rev. A. **63** (2000), 013409.

- [25] H. R. Reis, *Prog. Quantum Electron.* **16**, (1992) 1.
- [26] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Classical Theory of Fields* (Pergamon, Oxford, 1975).
- [27] E.S. Sarachik and G.T. Schappert, *Phys. Rev. D* **1**, (1970) 2738.
- [28] Adam Holman, *Strong-Field Laser Physics Modeling* (2005).
- [29] H. R. Reiss, *J. Opt. Soc. Am. B* **7**, (1990) 574.
- [30] H. R. Reiss, *Phys. Rev. A* **19**, (1979) 1140.
- [31] Y. Salamin, *Phys. Rev. A* **56**, (1997) 4910.
- [32] H. R. Reiss, *Phys. Rev. A* **22**, (1980) 1786.
- [33] L. V. Keldysh, *Sov. Phys. JETP* **20**, 1307 (1964); F. H. M.Faisal, *J. Phys. B* **6**, L89 (1973); H. Reiss, *Phys. Rev. A* **22**,1786 (1980); D. G. Lappas and P. L. Knight, *Comments At.Mol. Phys.* **33**, 237 (1997).
- [34] E.Aygün ve M.Zengin, *Atom ve Molekül Fiziği*, Bizim Büro Yayınevi, (1992).
- [35] Michael Klaiber, Karen Z. Hatsagortsyan and Christoph H. Keitel, *Above-threshold ionization beyond the dipole approximation*, *Phys.Rev. A* **71** (2005), 033408.
- [36] S. X. Hu and C. H. Keitel, *Dynamics of multiply charged ions in intense laser fields*, arXiv (2000).
- [37] E. S Sarachik and G. T. Schappert, *Phys. Rev. D* **1**, 2738 (1970).
- [38] M. W. Walser, D. J. Urbach, K. Z. Hatsagortsyan, S. X. Hu, and C. H. Keitel, *Phys. Rev. A* **65**, 043410 (2002).
- [39] J.J.Sakuari, *Modern Quantum Mechanics*. Universty of California, Los Angeles

[40] Anonymous

[41] D. Bauer *Theory of intense laser-matter interaction* (2006).

[42] D. B. Milosevic, G. G. Paulus and W. Becker, *High-order above-threshold ionization with few-cycle pulse: a meter of the absolute phase.*, Opt Express **11** (2003) 1418.

[43] M. Lewenstein *et al.* Phys. Rev. A **51**, 1495 (1995).

[44] W. Becker, F. Grasbon, R. Kopold, D. B. Milosevic, G. G. Paulus, and H. Walther, Adv. At., Mol., Opt. Phys. **48**, 35 (2001).

[45] D. B. Milosevic, S.X. Hu, and W. Becker, *Quantum-mechanical model for ultrahigh-harmonic generation in the moderately relativistic regime.* Laser Phys. **12** (2002),389.

[46] George Arfken, *Mathematical Methods For Physicists* (1970).

ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 2.3.1 θ ve ϕ açıları geometrik olarak tanımlanır. θ açısı p momentum vektörü ile ε kutuplanma vektörü arasındadır. ϕ açısı ise, \vec{k} yayılma vektörü ve p içindeki x -z düzleminin izdüşümü arasında yer almaktadır [5].

Şekil 3.1 Multifoton iyonlaşma sürecinin şematik diyagramı, atom, $(\hbar\omega)$ enerjisi, bağlanma enerjisinden (elektronun E_b si) daha küçük olan N fotonlarının soğurulması yoluyla iyonlaşır.

Şekil 3.2.1 İyonlaştırma mekanizmalarının şematik diyagramı **a)** bir-foton iyonlaşması; **b)** n fotonlar ile multifoton iyonlaşması; **c)** (n+s)fotonları ile eşik-üzerindeki iyonlaşma

Şekil 3.2.2 ATI elektron enerji tayfında Xe $\lambda = 1064nm$ ile 130 lazer atması [10]

(a) $I = 2.2 \times 10^{12} W / cm^2$; **(b)** $I = 1.1 \times 10^{13} W / cm^2$.

Şekil 3.2.3 Enerji seviyeleri: Solda, iyonlaşma için düşük şiddete N fotonları gerektirir, fakat şiddeti artırmak için daha yüksek duruma uzanan pondermotive enerjisi U_p ile ekstra bir S fotonu iyonlaşma için gerekli olur.

Şekil 3.2.4 Lazer şiddetine bağlı iyonlaşma potansiyelinin Stark yarılması. I_1 şiddetinde beş-fotonun iyonlaşmasıyla meydana gelir, oysa yüksek ışık şiddeti I_2 de iyonlaşma için birden fazla fotona ihtiyaç vardır. U_p tarafından artırılır.

Şekil 3.2.5 Bu şekil fotoelektron tayfında eşik üzeri iyonlaşmanın yoğunluk bölgesidir ve Schrödinger denkleminin sayısal çözümünün sonucunu gösterir. (Paulus,1996)

Şekil.4.1 “Figüre- 8” hareketinin yüksek şiddet alanında elektronun yörüngesi için bir diyagram.

Şekil.4.1.1 Manyetik alanın önemli olduğu nokta alt eğim çizginin yukarısı ile üst eğim çizginin alt kısmıdır ve eğim çizgileri herhangi bir frekansta birleşmez. Manyetik alanın önemsiz olduğu bölge ise alttaki eğim çizgisinin alt tarafta kalan alandır. Ayrıca üst eğim çizgisinin yukarısında kalan alanda görece etkiler göstermektedir. Lazer frekanslarına güçlü alan etkileri için şeklin en üst dalga boyu ölçeği oklarla belirtilmiştir [24].

Şekil 5.2.1 İyonik çekirdeğin lazer alanında iyonlaşma süreci sırasında iyonlaştırılan elektronun saçılmasını içerir. Lazer alanında x kutuplanma yönünü ve z ise yayılma yönünü gösterir.

Şekil 5.6.1 a) \tilde{t}'' tekrar saçılma zamanını gösterir. b) Denklem (5.4.23) ve denklem (5.4.30) göre \tilde{t}'' zamanı iyonlaşma zamanıdır. Şekildeki oklar U_p nin çokluğunda belirli olan son elektron enerjilerini gösterir. $9.34 U_p$ de seçilen enerji iki yolun birbirine yakın olduğu noktalarla verilir. Keskin çizgiler [44]'e göre belirlenen ince çizgiler boyunca yeniden gösterilen saddle point noktalarının olduğu denklem (5.4.31) yolu ile spektrum hesabında kullanılan saddle point noktalarını tanımlar.

Şekil 5.6.2 Lazer alanında fotoelektron tayfında açılmal frekans $\omega = 0.05$ a.u. ve güçlü elektrik kuvveti $E = 1.22$ a.u. $\log(|Mp|^2)$ ile denklem (5.4.31) te son elektron momentumuyla lazer kutuplanma yönü $p = (p, 0, 0)$. Elektron enerjisinde U_p :a) dipol yaklaşım b) manyetik alan düzeltmeleri c) manyetik alan düzeltmeleriyle ve görelî kütle değişimidir [35].

Şekil 5.6.3 Lazer alanında fotoelektron tayfında açılmal frekans $\omega = 0.05$ a.u. kesik enerjinin sınır noktasıdır. Kalın çizgi: dipol yaklaşım, noktalı çizgi: manyetik alan düzeltmeleri, kesik çizgi: manyetik alan düzeltmeleri ve görelî kütle değişimidir [35].

ÖZGEŞMİŞ

ESEN ARSLAN, 1982 yılında Hatay'da doğdum. İlk, orta ve lise öğrenimimi Hatay Samandağ ilçesinde tamamladım. 2000 yılında başladığım Dicle Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik bölümünden 2004 yılında mezun oldum. 2004 – 2007 yılları arasında Dicle Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsünde Yüksek Lisans öğrenimimi tamamladım.