

# МНОГОЧАСТИЧНЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ ОБРАЗОВАНИИ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ В СИЛЬНОМ ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ

Б. А. Зон<sup>a,b\*</sup>, А. С. Корнев<sup>a\*\*</sup>, Е. Б. Туленко<sup>a\*\*\*</sup>

<sup>a</sup> Воронежский государственный университет  
394006, Воронеж, Россия

<sup>b</sup> Белгородский государственный университет  
308015, Белгород, Россия

Поступила в редакцию 13 мая 2010 г.

Проведен учет некоторых многочастичных эффектов при образовании многозарядных ионов в лазерном поле: неупругого туннельного эффекта, коллективного туннельного эффекта, релаксации атомного остова по проекции магнитного момента. Рассмотрены сильные поля с интенсивностью, превышающей  $10^{17}$  Вт/см<sup>2</sup>, когда на свободное движение фотоэлектрона действует магнитная компонента лазерного поля, поэтому образование многозарядных ионов вследствие перерассеяния становится маловероятным. Численные расчеты проведены для ионов  $\text{Ar}^{9+}$  ...  $\text{Ar}^{13+}$ ,  $\text{Kr}^{19+}$  ...  $\text{Kr}^{23+}$ ,  $\text{Rb}^{10+}$  и  $\text{Rb}^{11+}$ . Обнаружен существенный вклад коллективного туннельного эффекта, который в более слабых полях, исследованных авторами ранее, не наблюдался. Показано, что учет коллективного туннелирования снижает интенсивность, приводящую к насыщению, более, чем на 10%. При этом выход многозарядных ионов Rb изменяется на порядок, а выход многозарядных ионов Ar и Kr — более, чем в два раза. Проведено сравнение с экспериментальными данными по образованию ионов аргона под воздействием линейно поляризованного лазерного импульса.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Образование многозарядных атомарных ионов (МЗИ) в сверхсильном лазерном поле с интенсивностью до  $10^{19}$  Вт/см<sup>2</sup> в последние годы активно изучается экспериментально [1–8]. В полях с такой интенсивностью начинают проявляться релятивистские эффекты. Первый эффект такого рода связан с действием магнитной компоненты светового поля лазерного излучения на движение свободного электрона. Этот эффект следует рассматривать как релятивистский, поскольку сила Лоренца, как известно, обратно пропорциональна скорости света. В результате действия силы Лоренца движение электрона в поле световой волны перестает быть прямолинейным, его траектория принимает форму «восьмерки» [9]. Вследствие этого процессы перерассеяния, игравшие главную роль при образовании многозарядных ионов в полях с меньшей интен-

сивностью [10, 11], когда при ускорении фотоэлектрона в лазерном поле происходит ударная ионизация с образованием ионов более высокой кратности, теперь становятся менее значимыми. Экспериментальное подтверждение подавления перерассеяния вследствие релятивистских эффектов отмечалось в работах [1, 2, 4] и наиболее детально исследовано в работе [7].

Поскольку процесс перерассеяния перестает быть доминирующим, образование многозарядных ионов происходит вследствие прямого воздействия лазерного поля на атом или ион. Существующая теория туннельного эффекта [12–15], известная как теория АДК, а также ее релятивистское обобщение [16, 17], является одночастичной. Поэтому образование многозарядных ионов в рамках этой теории возможно лишь вследствие последовательного отрыва каждого электрона от нейтрального атома или иона с образованием иона большей кратности в основном состоянии. Очевидно, что в этом отношении желательно провести усовершенствование теории АДК, включив в рассмотрение многочастичные эффекты.

\*E-mail: zon@niif.vsu.ru

\*\*E-mail: a-kornev@yandex.ru

\*\*\*E-mail: tulenko@mail.ru

В этом направлении нами ранее были выполнены работы [18, 19]. Рассматривались более слабые интенсивности лазерного излучения, когда релятивистские эффекты еще не проявляются. Для исключения эффектов перерассеяния лазерное поле считалось циркулярно поляризованным. Учитывались следующие многочастичные эффекты: 1) неупругий туннельный эффект (НТЭ), сопровождающийся возбуждением ионного остова [20]; 2) коллективное туннелирование нескольких электронов за один оптический полупериод [21] (см. также [22]). Результаты расчетов для иона  $\text{Ne}^{2+}$  [19] хорошо согласуются с экспериментальными результатами, полученными в работе [23]. Результаты наших теоретических расчетов вероятности образования ионов  $\text{Ar}^+ \dots \text{Ar}^{6+}$  [18] были позже проверены экспериментально в работе [24]. В этой работе использовалось циркулярно поляризованное излучение с интенсивностью  $10^{14}$ – $10^{16}$  Вт/см<sup>2</sup>. Полученные экспериментальные данные были приведены для пространственно-однородного лазерного луча, что позволило наблюдать уменьшение вероятности образования ионов кратности  $n$  вследствие образования из них ионов большей кратности. Напомним, что при гауссовом распределении интенсивности в лазерном луче подобное уменьшение не может наблюдаться. Все экспериментальные данные, полученные в работе [24], очень хорошо согласуются с результатами вычислений [18].

С точки зрения роли многочастичных эффектов в образовании многозарядных ионов, результаты работ [18, 24] подтверждают важность неупругого туннельного эффекта. Что же касается коллективного туннельного эффекта, то он при указанных интенсивностях  $10^{14}$ – $10^{16}$  Вт/см<sup>2</sup> не проявлялся. Как показано в недавней работе [25] на примере образования ионов  $\text{Rb}^{10+}$ ,  $\text{Rb}^{11+}$  в линейно поляризованном поле, роль коллективного туннелирования в образовании МЗИ становится важной, если интенсивность, требуемая для их получения, превышает  $10^{17}$  Вт/см<sup>2</sup>.

В работе [25] был исследован еще один многочастичный эффект: релаксация атомного остова по магнитным квантовым числам электронов  $m$ , который изучался теоретически [26] и экспериментально [27]. Было показано, что время релаксации существенно меньше длительности лазерного импульса, что согласуется с экспериментальными данными [27].

Целью настоящей работы является дальнейшее исследование образования многозарядных ионов в рамках многочастичной теории туннельного эффек-

та в полях с интенсивностью до  $10^{19}$  Вт/см<sup>2</sup>. Лазерное излучение предполагается линейно поляризованным, поскольку, как говорилось выше, в результате действия силы Лоренца на свободный электрон процессы ионизации вследствие перерассеяния подавляются.

В следующем разделе приводятся общие формулы, описывающие вероятность коллективного неупругого туннельного эффекта. В соответствии с результатами работ [16, 17], при кратности ионизации  $\lesssim 20$  процесс туннелирования можно рассматривать в нерелятивистском приближении. В разд. 3 приводятся кинетические уравнения, описывающие образование МЗИ с учетом многочастичных эффектов. Результаты вычислений вероятностей образования ионов  $\text{Ar}^{9+} \dots \text{Ar}^{13+}$ ,  $\text{Kr}^{19+} \dots \text{Kr}^{23+}$ ,  $\text{Rb}^{10+}$  и  $\text{Rb}^{11+}$  как для пространственно-однородного лазерного луча, так и для луча с гауссовым распределением интенсивности, приводятся в разд. 4. В разд. 5 проведено сравнение теоретических результатов с имеющимися экспериментальными данными. Показано, что одночастичная модель иногда приводит к качественным различиям между теоретическими и экспериментальными результатами.

Всюду, где не оговорено особо, используется атомная система единиц ( $\hbar = m_e = e = 1$ ).

## 2. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ МНОГЧАСТИЧНЫХ ЭФФЕКТОВ

В основе одночастичной теории туннелирования АДК лежит приближение квантового дефекта, хорошо известное в атомной и молекулярной физике [28]. Применимость теории квантового дефекта к основным и низко лежащим состояниям атомов обоснована в работе [29]. Используемая в данной работе вероятность коллективного туннелирования нескольких эквивалентных электронов была получена в работе [21]. Тем же автором в работе [20] учтен еще один многочастичный эффект — возбуждение остова в процессе одноэлектронного туннелирования. Подобный неупругий туннельный эффект получен в работе [20] в рамках приближения Карлсона [30], рассматривавшего однофотонную двухэлектронную ионизацию гелия. Поскольку изменение самосогласованного поля во внешней оболочке не учитывается, возбужденные состояния остаточного иона являются иными компонентами тонкой структуры того же мультиплета, к которому принадлежит и основное состояние остаточного иона. Согласие результа-

тов теории и эксперимента [18, 24] показывает, что данное приближение для рассматриваемой задачи является вполне удовлетворительным.

Оба многочастичных эффекта (коллективное и неупругое туннелирование) можно описать одной формулой, приведенной в работе [18] для циркулярно поляризованного излучения. Для линейно поляризованного излучения скорость неупругого коллективного туннелирования  $N$  эквивалентных электронов из оболочки нейтрального атома либо положительного иона дается следующим выражением<sup>1)</sup>:

$$W_{\kappa l \{m\}}^{(N, lin)} = \sqrt{\frac{6}{\pi}} \frac{M! \left(l + \frac{1}{2}\right)^N}{2M N^{M+7/2}} C_{\kappa l}^{2N} Q^2 \kappa^{3N-1} \times \\ \times \left(\frac{2F_a}{F}\right)^{2(Z/\kappa-1)N-M+1/2} \exp\left(-\frac{2NF_a}{3F}\right) \times \\ \times \prod_{j=1}^N \frac{(l+m_j)!}{m_j!^2 (l-m_j)!}. \quad (1)$$

Здесь индекс  $\{m\}$  обозначает совокупность проекций орбитальных моментов испускаемых электронов  $(m_1, m_2, \dots, m_N)$ , так что

$$M = \sum_{j=1}^N |m_j|,$$

$l$  — орбитальное квантовое число электрона,

$$\kappa = \sqrt{\frac{2E^{(N)}}{N}}, \quad E^{(N)} = \sum_{j=1}^N E_j, \quad E_j = E_j^{(0)} - \Delta_j,$$

$E_j^{(0)}$  —  $j$ -й потенциал ионизации исходного атома (или иона),  $\Delta_j$  — энергия возбуждения остова,  $F_a = \kappa^3$  — характерная напряженность внутриатомного поля,  $F$  — амплитуда напряженности электрического поля лазерной волны,  $Z$  — заряд остаточного иона,  $Q$  — интеграл перекрытия. Интегралы перекрытия в схеме  $LS$ -связи вычислены в Приложениях А, В.

Константа  $C_{\kappa l}$  в формуле (1) определяется асимптотическим поведением одноэлектронной волновой функции свободного атома (или иона) при  $r \gg 1$ :

$$\psi(\mathbf{r}) \approx C_{\kappa l} \kappa^{3/2} (\kappa r)^{N(\frac{Z}{\kappa}-1)} e^{-\kappa r} Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}).$$

<sup>1)</sup> В формуле (1) устранена опечатка, допущенная в работе [18] в показателе степени  $N$  в предэкспоненциальном множителе.

Наиболее точным методом вычисления  $C_{\kappa l}$  является прямое численное интегрирование уравнений Хартри–Фока для свободного атома. Для вычислений  $C_{\kappa l}$  в приближении квантового дефекта требуется знание ридберговского спектра атома или иона для всей рассматриваемой серии [31]. Для исследованных нами многозарядных ионов подобная информация отсутствует [32]. Поэтому в данной работе использовалась квазиклассическая формула [21], о точности которой можно судить по результатам, представленным в работе [31]:

$$C_{\kappa l} = \frac{(2/\nu)^\nu}{\sqrt{2\pi\nu}} \left(\frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}\right)^{(l+1/2)/2} (1-\varepsilon^2)^{-\nu/2}. \quad (2)$$

Здесь  $\nu = Z/\kappa$ ,  $\varepsilon = (l+1/2)/\nu$  — эксцентриситет классической электронной орбиты. Выражение (2) получено для случая  $\varepsilon < 1$ . При  $\varepsilon > 1$  квазиклассическое приближение неприменимо и для получения  $C_{\kappa l}$  требуются численные методы.

Условиями применимости формулы (1) являются малость квадрата  $N$ -частичного параметра Келдыша:

$$\gamma^2 = \frac{\omega^2}{F^2} \frac{2E^{(N)}}{N} \ll 1, \quad (3)$$

где  $\omega$  — частота излучения, и малость напряженности внешнего поля по сравнению с внутриатомным:

$$F \ll F_a. \quad (4)$$

Выполнение условия (3) обеспечивает туннельный режим ионизации, при котором скорость ионизации не зависит от частоты излучения. Условие (4) позволяет не учитывать влияние светового поля на связанный электрон, что используется при выводе формулы (1). Заметим, что для высоковозбужденных (ридберговских) состояний, характеризующихся большой величиной  $\nu$ , условие (4) можно заменить более строгим вследствие включения надбарьерного режима ионизации (более подробное обсуждение см. в работе [21]). Состояния родительского и остаточного ионов учитываются в формуле (1) через параметры  $\kappa$  и  $Q$ .

В работе [26] обсуждалась роль магнитного квантового числа  $m$  в образовании многозарядных ионов. Согласно данным этой работы, на переднем фронте лазерного импульса испускаются электроны с нулевой проекцией полного момента на направление электрического поля линейно поляризованного лазерного излучения. Электроны, для которых  $|m| > 0$ , испускаются при большей интенсивности излучения. В результате возникает специфическое

угловое распределение фотоэлектронов. Однако экспериментальные данные, приведенные в работе [27], указывают на то, что при последовательной ионизации происходит быстрая  $m$ -релаксация оставшихся электронов в ионном остове.

Быстрая релаксация, наблюдавшаяся в работе [27], может быть обусловлена электростатическим взаимодействием электронов из рассматриваемой оболочки, приводящим к формированию общего орбитального момента оболочки  $L$  (в схеме  $LS$ -связи). Для оценки ее скорости воспользуемся квантовым соотношением неопределенности «энергия–время». Полагая расстояние между ионными уровнями порядка 1 эВ (см. табл. 1), получим для времени  $m$ -релаксации оценку:  $\tau_{relax} \approx 6 \cdot 10^{-16}$  с, что существенно короче как экспериментально использовавшихся в работе [27] лазерных импульсов — приблизительно 40 фс, — так и импульсов, рассматриваемых в данной работе.

Предположение о быстрой  $m$ -релаксации фактически содержится в формуле (1), поскольку наличие интегралов перекрытия в (1) предполагает формирование  $LS$ -состояний за времена, значительно меньшие, чем обратная вероятность туннельного эффекта.

### 3. КИНЕТИЧЕСКИЕ УРАВНЕНИЯ

В настоящей работе туннельное образование МЗИ рассматривается как многоканальный каскадный процесс. Он включает в себя и одноэлектронные, и коллективные туннельные каскадные переходы, которые могут сопровождаться возбуждением ионного остова. Существенно, что число каскадных каналов стремительно растет с увеличением кратности ионизации. Помимо того, испускаемые электроны могут иметь различные проекции орбитального момента  $m$ , что в свою очередь приводит к дальнейшему ветвлению каскадного процесса.

Многokратная ионизация нейтральных атомов в туннельном режиме под действием лазерного импульса описывается системой кинетических уравнений для заселенностей различных ионных состояний  $C_f$  [18]:

$$\frac{dC_f}{dt} = \sum_{f'=0}^{f-1} W_{f' \rightarrow f} C_{f'} - \sum_{f'=f+1}^{f_{tot}} W_{f \rightarrow f'} C_f, \quad (5)$$

$f = 0, 1, \dots, f_{tot},$

$$C_0(-\infty) = 1, \quad C_1(-\infty) = \dots = C_{f_{tot}}(-\infty) = 0. \quad (6)$$

Индексы  $f, f'$  в уравнениях (5) нумеруют ионные состояния с зарядами соответственно  $Z$  и  $Z'$ , в том числе и возбужденные состояния ионов, которые как раз и отвечают неупругому туннельному эффекту;  $f_{tot}$  — число задействованных ионных состояний.  $W_{f' \rightarrow f}$  — скорость туннельного перехода из состояния  $|f'\rangle$  в состояние  $|f\rangle$ , получаемая из формулы (1) заменой напряженности монохроматического поля  $F$  на огибающую импульса  $F(t)$ . Первое слагаемое в уравнениях (5) соответствует увеличению заселенности состояния  $|f\rangle$  с зарядом  $Z$  за счет ионизации ионов меньшей кратности  $Z'$ , и поэтому первая сумма по  $f'$  распространяется лишь на состояния с  $Z' < Z$ . Второе слагаемое в (5) соответствует уменьшению заселенности состояния  $|f\rangle$  за счет его дальнейшей ионизации, поэтому вторая сумма по  $f'$  содержит только состояния с  $Z' > Z$ . Уравнения (5) не учитывают рекомбинацию вследствие уширения волнового пакета фотоэлектронов при движении в лазерном поле.

В дальнейшем нас будет интересовать ионизация электронов с орбитальным квантовым числом  $l$  при лазерной интенсивности выше  $10^{17}$  Вт/см<sup>2</sup>. Полная ионизация внешних оболочек нейтральных атомов происходит в диапазоне  $10^{14}$ – $10^{16}$  Вт/см<sup>2</sup> [18, 19]. Поэтому перед фронтом импульса все атомы можно считать ионизованными до терма  $l^{2(2l+1)}(^1S_0)$ . Таким образом, индексам  $f, f'$  соответствуют состояния  $|l^k(aSL)JM_J\rangle$  (см. Приложение А). В частности, под  $f = 0$  здесь следует понимать состояние  $|l^{2(2l+1)}(^1S_0)00\rangle$ . Величину  $C_f$  следует рассматривать как отношение концентрации ионов  $n_f$  в состоянии  $|f\rangle$  к концентрации нейтральных атомов  $n_{tot}$  в газовой мишени или  $n_0 = n_{tot}$  перед фронтом импульса:

$$C_f(t) = \frac{n_f(t)}{n_0(-\infty)}, \quad \sum_{f=0}^{f_{tot}} n_f(t) = n_0(-\infty).$$

Начальные условия (6) формулируются для момента времени, предшествующего приходу лазерного импульса, поэтому в аргументах  $C_f$  формально присутствует  $-\infty$ . Результатом интегрирования уравнений (5) является набор значений  $C_f(\infty)$ , определяющих концентрацию ионов в каждом состоянии по завершении лазерного импульса.

### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В данном разделе представлены результаты интегрирования кинетических уравнений (5), описы-

Таблица 1. Параметры внешних оболочек ионов  $\text{Ar}^{8+} \dots \text{Ar}^{14+}$  и  $\text{Kr}^{18+} \dots \text{Kr}^{24+}$ 

X	Внешняя оболочка		Энергии ионизации (курсив) и возбуждения [32], Ry	
			$\text{Ar}^{(8+X)+}$	$\text{Kr}^{(18+X)+}$
0	$p^6$	$^1S_0$	0	0
1	$p^5$	$^2P_{3/2}$	<i>31.056</i>	<i>63.00500</i>
		$^2P_{1/2}$	0.16462	0.912269
2	$p^4$	$^3P_2$	<i>35.256</i>	<i>66.54072</i>
		$^3P_1$	0.13171	0.82898
		$^3P_0$	0.16683	0.45727
		$^1D_2$	0.65459	1.16806
		$^1S_0$	1.3533	2.28655
3	$p^3$	$^4S_{3/2}$	<i>39.691</i>	<i>70.47648</i>
		$^2D_{3/2}$	0.86407	0.78805
		$^2D_{5/2}$	0.89439	1.07910
		$^2P_{1/2}$	1.35941	1.51581
		$^2P_{3/2}$	1.4038	2.19851
4	$p^2$	$^3P_0$	<i>45.476</i>	<i>75.24332</i>
		$^3P_1$	0.08984	0.72910
		$^3P_2$	0.19911	0.980797
		$^1D_2$	0.77487	1.92168
		$^1S_0$	1.47751	2.57242
5	$p^1$	$^2P_{1/2}$	<i>50.41</i>	<i>79.41054</i>
		$^2P_{3/2}$	0.20647	1.01278
6	$p^0$	$^1S_0$	<i>55.506</i>	<i>82.67926</i>

вающих процесс образования многозарядных ионов под действием лазерного импульса с гауссовой огибающей

$$F(t) = F_0 \exp\left(-\frac{t^2 \ln 2}{T^2}\right),$$

где  $F_0$  — максимальная напряженность электрического поля,  $T$  — длительность, или время уменьшения огибающей импульса в два раза. В этом случае в начальных условиях (6) достаточно заменить аргумент  $-\infty$  на  $-2T$ , а в качестве верхнего предела интегрирования взять  $2T$ . Выходные параметры  $C_f(2T)$  являются функциями пиковой интенсивности  $I_0$  в импульсе.

Вычисления проводились для ионов  $\text{Ar}^{9+} \dots \text{Ar}^{13+}$ ,  $\text{Kr}^{19+} \dots \text{Kr}^{23+}$  и  $\text{Rb}^{10+} \dots \text{Rb}^{12+}$  в газообразной мишени в зависимости от максимальной интенсивности  $I_0$  в линейно поляризованном лазер-

ном импульсе с длительностью 2 фс (для аргона и криптона) и 5 фс (для рубидия). Для ионов криптона  $3d$ -оболочка предполагается полностью ионизованной: как можно видеть по экспериментальным данным для ионов ксенона [4], образование  $\text{Xe}^{19+}$  с внешней  $p$ -оболочкой начинается практически в режиме насыщения  $\text{Xe}^{18+}$  с внешней  $d$ -оболочкой, поскольку потенциалы ионизации  $p$ -оболочки более чем в два раза превосходят потенциалы ионизации  $d$ -оболочки. Учтены одно-, двух- и трехэлектронные коллективные переходы между всеми состояниями, указанными в табл. 1, 2. Учитываются только те возбужденные состояния, в которых главные квантовые числа не изменяются. В противном случае энергии возбуждения возрастают на один-два порядка, становясь сравнимыми с потенциалами ионизации и приводя к экспоненциальному уменьшению

**Таблица 2.** Параметры внешних оболочек ионов  $Rb^{9+} \dots Rb^{12+}$ : энергии ионизации (курсив) и возбуждения [32]

Ион	Внешняя оболочка		Энергия, Ry
$Rb^{9+}$	$3d^{10}$	$^1S_0$	<i>20.32126</i>
$Rb^{10+}$	$3d^9$	$^2D_{5/2}$	<i>23.14618</i>
		$^2D_{3/2}$	0.11263
$Rb^{11+}$	$3d^8$	$^3F_4$	26.88238
		$^3F_3$	0.10006
		$^3F_2$	0.14225
		$^1D_2$	0.31001
		$^3P_1$	0.42447
		$^3P_0$	0.43030
		$^3P_2$	0.43805
		$^1G_4$	0.52562
		$^1_0S_0$	1.15977
$Rb^{12+}$	$d^7$	$^4F_{9/2}$	<i>30.70970</i>
		$^4F_{7/2}$	0.08779
		$^4F_{5/2}$	0.13906
		$^4F_{3/2}$	0.17050
		$^4P_{3/2}$	0.36396
		$^4P_{5/2}$	0.39124
		$^2G_{9/2}$	0.40867
		$^2G_{7/2}$	0.49097
		$^2H_{11/2}$	0.55505
		$^2H_{9/2}$	0.64263
		$^2D_{5/2}$	0.58273
		$^2D_{3/2}$	0.72273
		$^2F_{5/2}$	0.87492
		$^2F_{7/2}$	0.919933
		$^2_1D_{3/2}$	1.35396
$^2_1D_{5/2}$	1.39998		

соответствующих вероятностей. Аналогичная ситуация имеет место и в случае ионов  $Ar^{9+} \dots Ar^{13+}$ ,  $Kr^{19+} \dots Kr^{23+}$  с внешней  $p$ -оболочкой.

#### 4.1. Заселенности зарядовых состояний

Введем концентрацию ионов с заданной кратностью  $X$  во всех состояниях  $l$ -оболочки  $|f_1(X)\rangle$ ,

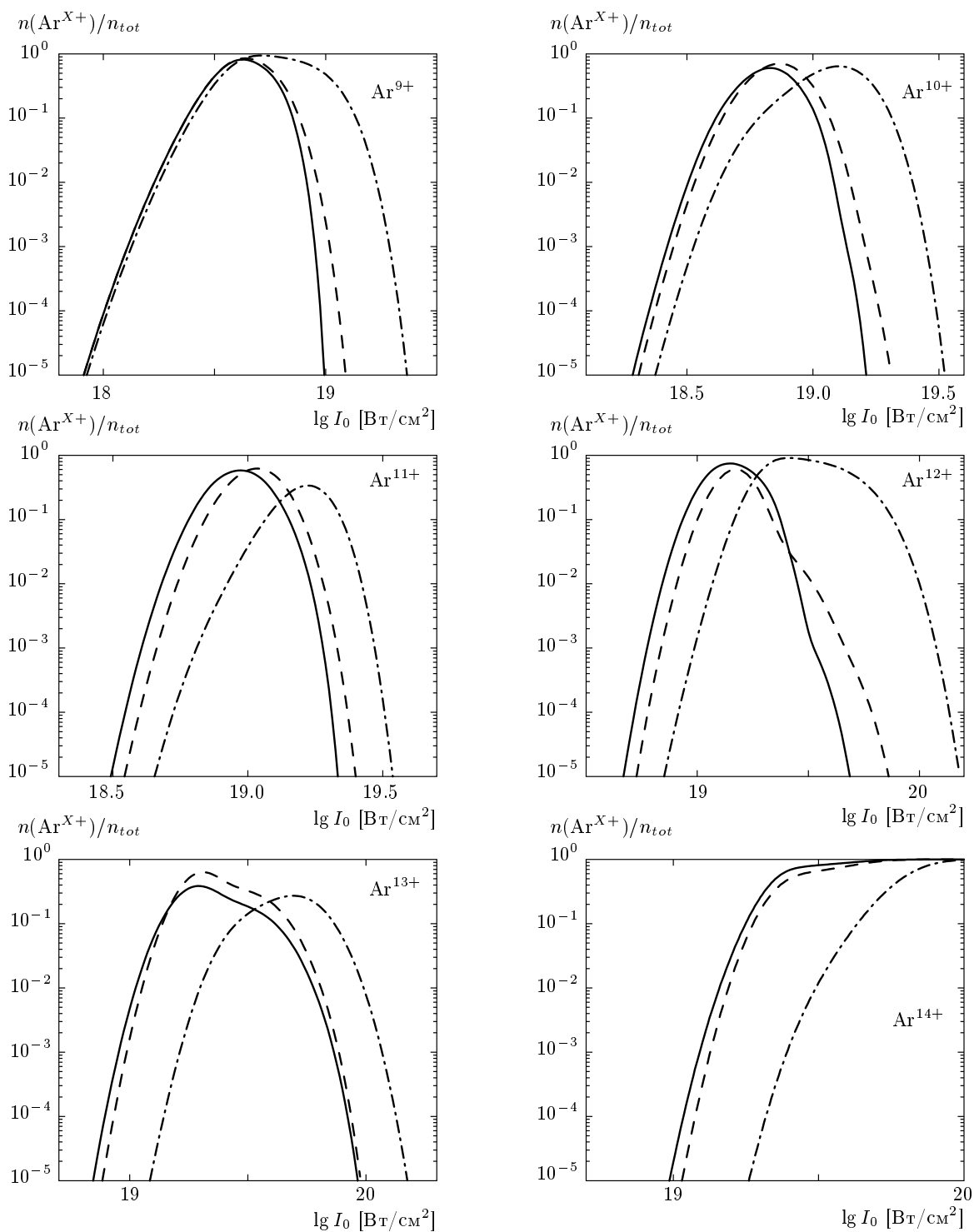
$|f_2(X)\rangle, \dots, |f_{max}(X)\rangle$ :

$$n(A^{X+}) = \sum_{f=f_1(X)}^{f_{max}(X)} n_f. \quad (7)$$

По аналогии с (7) можно ввести концентрацию ионов с заданным электронным термом  $n[A^{X+}(aSLJ)]$ . Во всех случаях в выражении (7) подразумевается суммирование по всем значениям проекций углового момента. В настоящей работе величины  $n(A^{X+})$  вычисляются как функции максимального значения интенсивности  $I_0$  в импульсе после его завершения. Получаемые таким образом результаты справедливы для пространственно-однородного лазерного пучка с бесконечно большим фокальным диаметром.

На рис. 1, 2 представлены результаты расчета величин  $n(Ar^{9+}) \dots n(Ar^{13+})$  и  $n(Kr^{19+}) \dots n(Kr^{23+})$ . Результаты разделены на три группы. Первая группа соответствует учету только последовательных одноэлектронных переходов между основными состояниями ионов (модель АДК). В этом случае в кинетических уравнениях (5) задействованы 15 зарядовых состояний, а число возможных каналов ионизации достигает 80. Вторая группа соответствует всем возможным последовательным одноэлектронным переходам, включая НТЭ. В третью группу дополнительно включены коллективные двухэлектронные туннельные переходы. В этих случаях в кинетических уравнениях (5) задействовано 61 зарядовое состояние, а число возможных каналов ионизации превышает  $10^5$ . Трехэлектронный коллективный туннельный эффект в исследованных каналах существенным образом не влияет на результат и поэтому на рисунках не представлен.

Как и в случае с ионами тех же атомов меньшей кратности [18, 19], учет возбуждения остова практически не влияет на процесс ионизации первого электрона оболочки в области нарастания заселенности ионов  $Ar^{9+}$  и  $Kr^{19+}$ . Подобно результатам [18, 19], отличие от модели АДК на один-два порядка проявляется лишь при ионизации второго электрона в оболочке ( $Ar^{10+}$  или  $Kr^{21+}$ ), что является следствием стремительного роста числа каналов ионизации. В противоположность результатам [18, 19] в случае с ионами более высокой кратности становится заметным двухэлектронный коллективный НТЭ. Он проявляется в процессе образования ионов  $Ar^{10+}$ ,  $Kr^{21+}$  и для ионов более высокой кратности. Если для аргона вклад двухэлектронного процесса превышает вклад одноэлектронного в 2–2.5 раза, то для криптона и соответственно большей интенсивности излу-



**Рис. 1.** Отношение концентрации МЗИ  $\text{Ar}^{X+}$  с конфигурацией  $[\text{He}]2s^22p^{6-X}$  к концентрации нейтральных атомов перед воздействием лазерного импульса с длительностью  $T = 2$  фс как функция максимальной интенсивности импульса. Сплошные кривые соответствуют учету одно- и двухэлектронных переходов с возбуждением остова, штриховые — только последовательных одноэлектронных переходов с возбуждением остова, штрихпунктирные — последовательных одноэлектронных переходов между основными состояниями МЗИ (модель АДК)

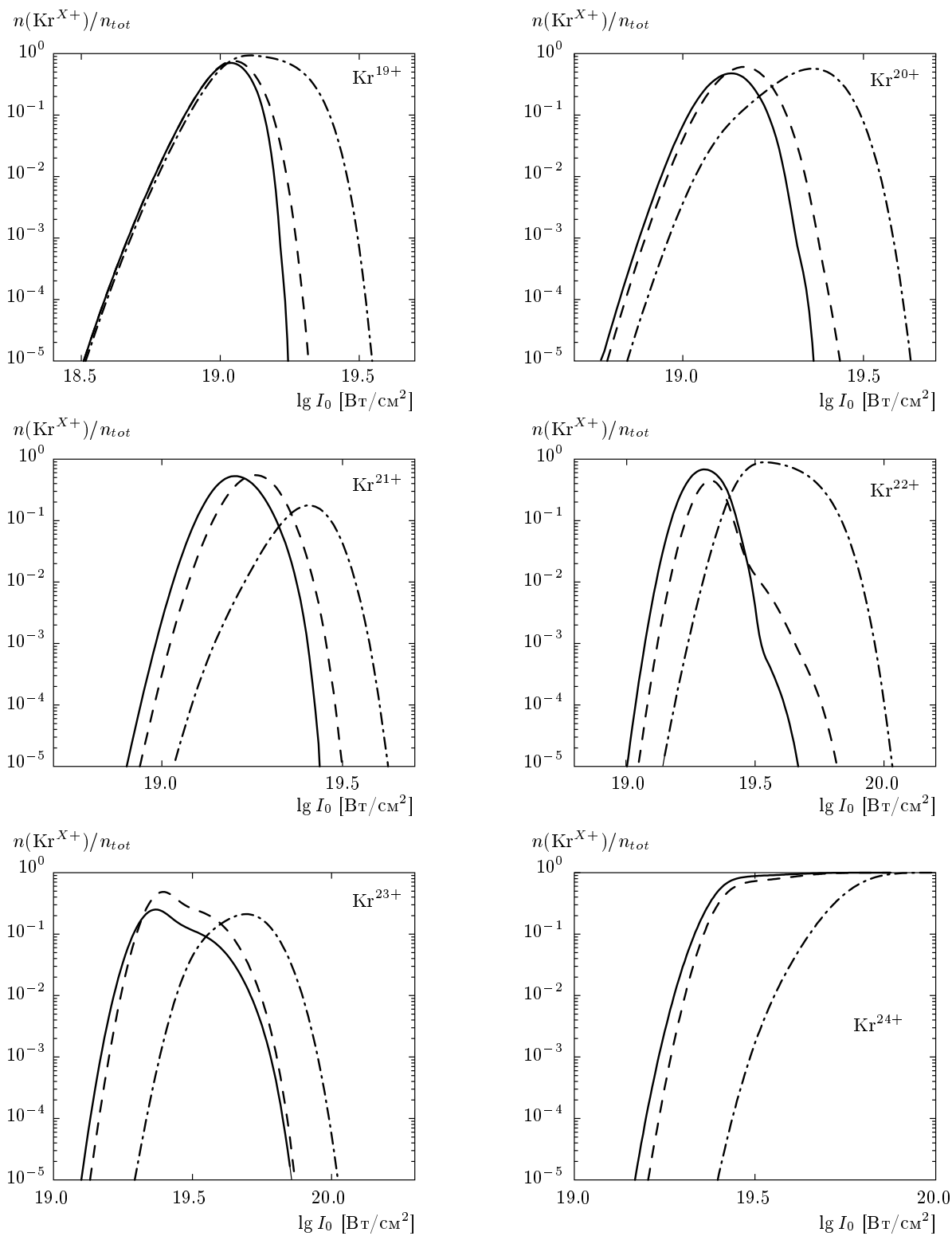


Рис. 2. То же, что на рис. 1, но для ионов  $\text{Kr}^{X+}$  с конфигурацией  $[\text{Ne}]3s^23p^{6-X}$



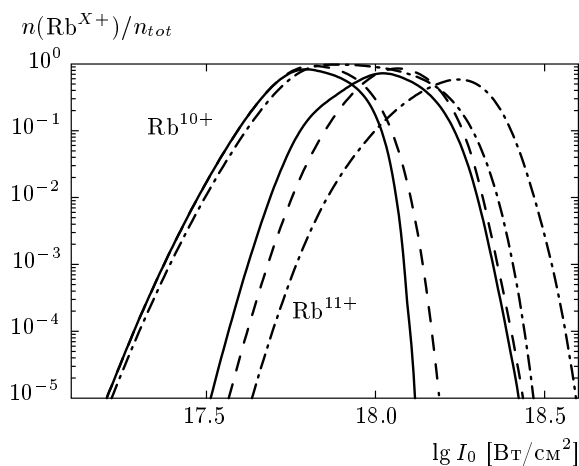


Рис. 3. То же, что на рис. 1, но для ионов  $Rb^{X+}$  с конфигурацией  $[Ar]3d^{19-X}$

чения это различие может достигать одного порядка. Различие между одно- и двухэлектронным НТЭ для ионов  $Ar^{10+}$  и  $Kr^{20+}$  проявляется лишь в области убывания заселенности. Заметим, что двухэлектронный НТЭ крайне незначительно проявляется в заселенностях зарядовых состояний  $Ar^{1+} \dots Ar^{5+}$  и  $Kr^{1+} \dots Kr^{5+}$  вдали от точек насыщения.

В использованном нами приближении дальнейшая ионизация  $Ar^{14+}$ ,  $Kr^{24+}$  не рассматривается из-за отсутствия спектроскопической информации о возбужденных состояниях этих ионов. Тем не менее, их дальнейшая ионизация также возможна, что показано в эксперименте по ионизации аргона [3]. Результаты по выходу МЗИ  $Ar^{14+}$  и  $Kr^{24+}$  приведены здесь лишь для иллюстрации и не могут быть использованы для сопоставления с экспериментом.

Обратим внимание на существенное превышение заселенностей  $Ar^{13+}$  и  $Kr^{23+}$  (соответственно рис. 1, 2), рассчитанных с учетом только одноэлектронных последовательных неупругих туннельных переходов, над полученными с учетом двухэлектронного коллективного туннельного эффекта. Данный факт можно объяснить возрастающей вероятностью двухэлектронных переходов  $Ar^{12+} \rightarrow Ar^{14+}$  и  $Kr^{22+} \rightarrow Kr^{24+}$  при увеличении интенсивности лазерного излучения. Подобная ситуация имеет место и для ионов  $Ar^{10+}$ ,  $Kr^{20+}$ , но при этом эффект заметен слабее.

Для полноты изложения приведем результаты расчета заселенностей состояний  $Rb^{10+}$  и  $Rb^{11+}$  в газообразной мишени при  $T = 5$  фс, выполненного в нашей недавней работе [25] (см. рис. 3). В этих состояниях из замкнутой  $d$ -оболочки удалены со-

ответственно один и два электрона. Эти МЗИ образуются при меньшем значении интенсивности по сравнению с аргоном вследствие более низких потенциалов ионизации. Поэтому различие между одно- и двухэлектронным коллективным туннельным эффектом здесь выражено слабее, чем для аргона. При  $T = 40$  фс коллективный туннельный эффект практически не заметен [25] и результаты здесь не приводятся.

В случае рубидия для модели АДК в кинетических уравнениях (5) задействованы 20 зарядовых состояний, а число возможных каналов ионизации достигает 210. В многочастичной модели в кинетических уравнениях (5) задействованы 173 зарядовых состояния, а число возможных каналов ионизации превышает 50000.

В работе [25] вычислен также вклад отдельных мультиплетов в образование МЗИ  $Rb^{10+}$  и  $Rb^{11+}$  при  $T = 5$  фс. В настоящей работе эти данные не представлены. Подобные результаты могут быть получены и для исследованных ионов аргона и криптона.

В работе [21] было указано, что двухэлектронный коллективный туннельный эффект может быть более вероятен, чем последовательное одноэлектронное туннелирование. Данный факт обусловлен структурой экспоненциальных множителей в выражении (1). Однако при учете насыщения концентрации ионов более низкой кратности и предэкспоненциальных множителей в (1) невозможно без детальных расчетов сделать однозначный вывод относительно проявления коллективного туннельного эффекта.

В реальном случае интенсивность излучения в лазерном пучке не является пространственно-одномерной. Процедура приведения результатов эксперимента к пространственно-однородному распределению интенсивности предложена в работе [33]. Она основана на методе селективного сканирования интенсивности в лазерном пучке [34]. С помощью данной процедуры в работе [24] измерены заселенности ионов  $Ar^{1+} \dots Ar^{5+}$  после воздействия на газ импульса циркулярно поляризованного излучения с  $T = 50$  фс и центральной длиной волны 790 нм. Данный эксперимент полностью подтвердил многочастичную теорию туннельного эффекта [18], используемую в настоящей работе.

#### 4.2. Выход ионов в гауссовом пучке

Вычислим теперь выход многозарядных ионов в случае близкого к реальному распределению ин-

тенсивности лазерного излучения, соответствующего сфокусированному пучку с учетом дифракции. В большинстве экспериментов (см., например, [27]) ионы экстрагируются из всего фокального объема, а не из его отдельных элементов [34]. Поэтому помимо заселенности необходимо получить абсолютное количество ионов в заданных состояниях в фокальном объеме.

Рассмотрим сфокусированный лазерный луч с гауссовым распределением пиковой интенсивности по сечению:

$$I(\mathbf{r}) = I_b(z) \exp \left[ -\frac{2r^2}{r_b^2(z)} \right], \quad (8)$$

где

$$r_b(z) = r_0 [1 + (z/z_0)^2]^{1/2}, \\ I_b(z) = I_a [1 + (z/z_0)^2]^{-1},$$

$r_0$  — радиус перетяжки пучка,  $I_a$  — пиковая интенсивность на оси пучка в точке перетяжки (абсолютная интенсивность),  $z_0$  — параметр Рэлея, даваемый соотношением  $z_0 = \pi r_0^2 / \lambda$ ,  $\lambda$  — длина волны лазерного излучения. Если проинтегрировать заселенность  $C_f(I(\mathbf{r}))$  по объему пучка, получим интегральный выход ионов:

$$P_f(I_a) = n_{tot} \int C_f(I(\mathbf{r})) d^3r = \frac{n_{tot}}{\lambda} (\pi r_0^2)^2 \times \\ \times \int_0^\infty d\zeta (1 + \zeta^2)^{-I_a/(1+\zeta^2)} \int_0^{I_a/(1+\zeta^2)} C_f(I') \frac{dI'}{I'}, \quad (9)$$

где  $\zeta = z/z_0$ . Величина (9) имеет смысл абсолютного количества ионов в состоянии  $|f\rangle$  внутри фокального объема. По аналогии с (7) введем выход ионов  $P(A^{X+})$ , имеющих заряд  $X$  во всех возможных состояниях электронных оболочек. В соответствии с работой [35], в области насыщения  $P(I_a) \sim I_a^{3/2}$ , что обусловлено совместным влиянием уменьшения числа МЗИ в заданном состоянии и роста фокального объема.

Зависимости  $P(\text{Ar}^{9+}) \dots P(\text{Ar}^{13+})$  и  $P(\text{Kr}^{19+}) \dots P(\text{Kr}^{23+})$  от абсолютной интенсивности  $I_a$  при  $T = 2$  фс представлены соответственно на рис. 4, 5. Пространственное усреднение здесь по-прежнему сохраняет в ряде случаев заметное различие между одно- и двухэлектронным НТЭ. В отличие от образования МЗИ меньшей кратности и с меньшими потенциалами ионизации [18, 19, 25], в данном случае сравнение групп результатов удобно проводить по положению границы перехода в область насыщения. Так, для аргона учет двухэлектронного НТЭ

приводит к снижению границы насыщения у  $\text{Ar}^{11+}$ ,  $\text{Ar}^{12+}$ ,  $\text{Kr}^{21+}$  и  $\text{Kr}^{22+}$  более, чем на 10%. При этом выход МЗИ  $\text{Ar}^{12+}$  и  $\text{Kr}^{22+}$  повышается более, чем в два раза.

В литературе имеются экспериментальные данные по выходу МЗИ аргона как функции абсолютной интенсивности лишь до кратности +9 при  $T = 25$  фс [6]. Но в таких МЗИ ионизуется лишь первый электрон оболочки. Как было показано нами в работе [19], в этом случае, незначительно сдвигая график по оси интенсивности ( $\sim 5\%$ ), можно достичь хорошего согласия с экспериментом. Только после такой «калибровки» возможно проводить сопоставление с экспериментом для ионов с оболочками без двух, трех и более электронов (в нашем случае для  $\text{Ar}^{10+}$ ,  $\text{Ar}^{11+}$  и т. д.).

Существующие экспериментальные данные для криптона получены лишь для МЗИ с внешней  $d$ -оболочкой [3, 7, 27]. Для них спектральная информация отсутствует [32] и расчеты их выхода в рамках рассматриваемой модели провести невозможно. Заметим, однако, что в цитированных работах [7, 27] авторы уже отмечали отличие своих экспериментальных данных от результатов модели АДК. Отсутствие спектральных данных для МЗИ ксенона высоких кратностей также не позволяет выполнить соответствующие расчеты, несмотря на выполненные эксперименты [3, 6, 36].

Зависимости  $P(\text{Rb}^{10+})$  и  $P(\text{Rb}^{11+})$  от абсолютной интенсивности  $I_a$  при  $T = 5$  фс приведены на рис. 6 (взяты из [25]). Пространственное интегрирование здесь по-прежнему сохраняет заметное различие между случаями одно- и двухэлектронного НТЭ. Данное различие уменьшается с уменьшением интенсивности излучения. К сожалению, в настоящее время рубидий является единственным элементом с внешней  $d$ -оболочкой, для ионов которого имеются спектроскопические данные (конфигурация термов и энергии ионизации) [32].

## 5. СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Среди исследованных в настоящей работе многозарядных ионов в эксперименте были получены  $\text{Ar}^{9+}$ ,  $\text{Ar}^{11+}$ ,  $\text{Ar}^{12+}$  и  $\text{Ar}^{13+}$  [3]. Авторами работы [3] использовался титан-сапфировый лазер с центральной длиной волны 800 нм и длительностью импульса  $T = 25$  фс. Как показано в работе [25] на примере  $\text{Rb}^{9+} \dots \text{Rb}^{11+}$ , при таких параметрах излучения коллективный туннельный эффект не проявляется. Поэтому для сравнения теории с экспериментом мы

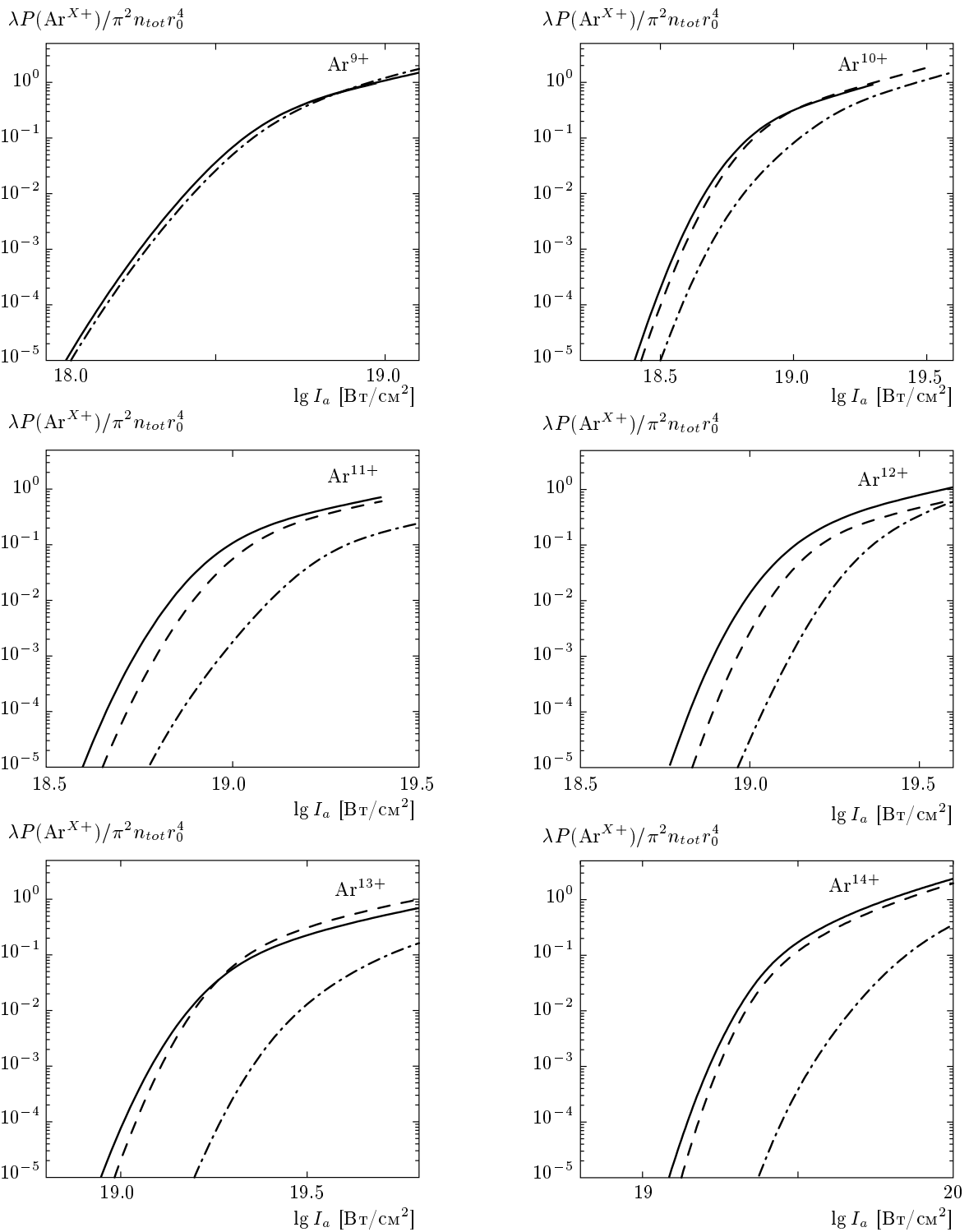


Рис. 4. Выход ионов  $\text{Ar}^{9+} \dots \text{Ar}^{14+}$ , проинтегрированный по фокальному объему. Обозначения те же, что на рис. 1

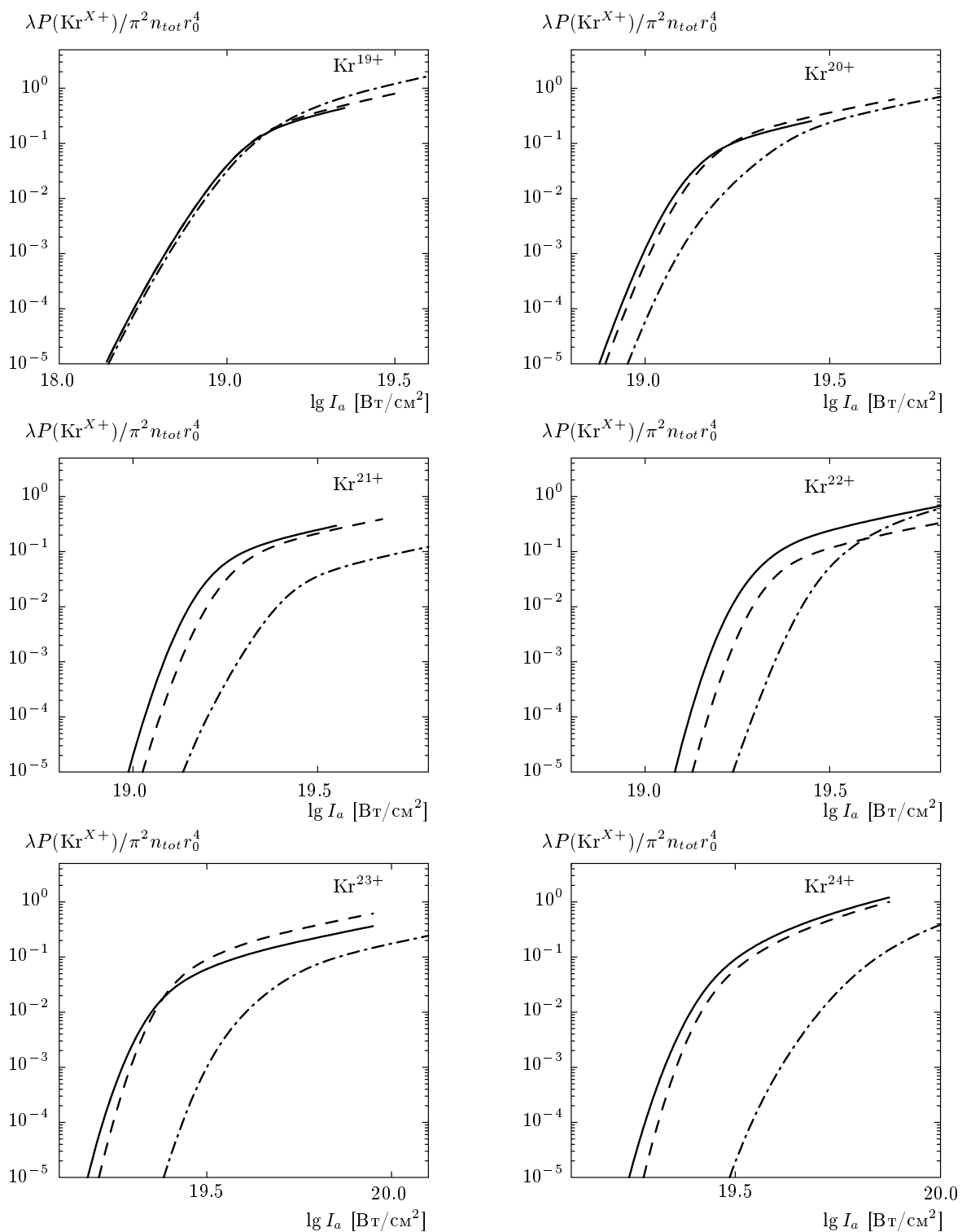


Рис. 5. Выход ионов  $\text{Kr}^{19+} \dots \text{Kr}^{24+}$ , проинтегрированный по фокальному объему. Обозначения те же, что на рис. 1

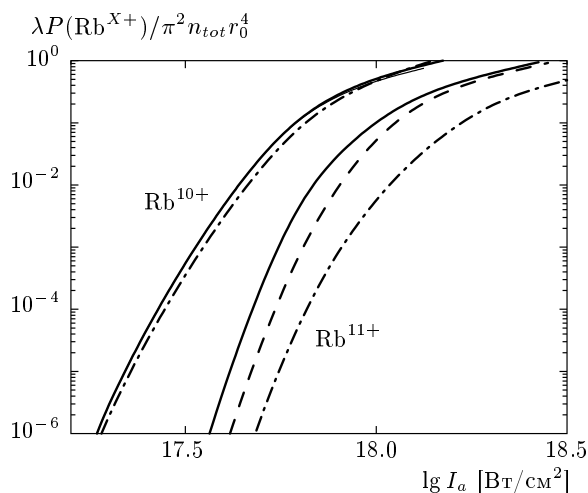


Рис. 6. Выход ионов  $Rb^{10+}$ ,  $Rb^{11+}$ , проинтегрированный по фокальному объему. Обозначения те же, что на рис. 1

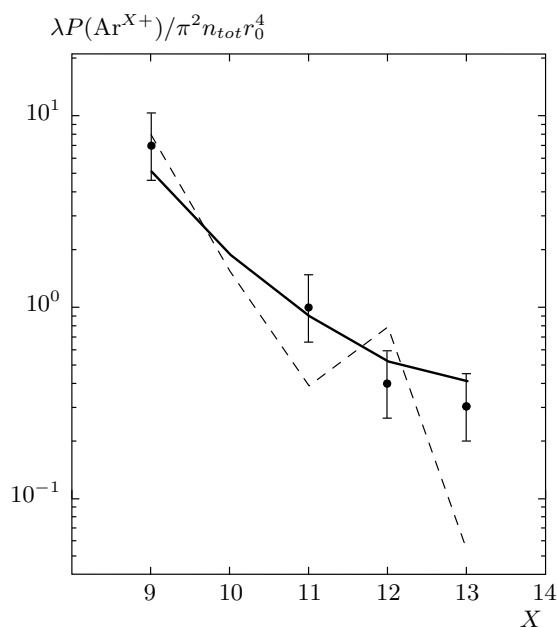


Рис. 7. Выход ионов  $Ar^{9+}$  . . .  $Ar^{13+}$ , проинтегрированный по фокальному объему, как функция заряда иона. Абсолютная интенсивность излучения  $2.6 \cdot 10^{19}$  Вт/см<sup>2</sup>. Экспериментальные результаты (точки) взяты из работы [3]. В эксперименте за единицу принят выход ионов  $Ar^{11+}$ . Сплошная линия соответствует модели одноэлектронного неупругого туннельного эффекта, штриховая — модели АДК. Результаты расчета уменьшены в 1.14 раз

ограничились одноэлектронным неупругим туннельным эффектом. Результаты представлены на рис. 7.

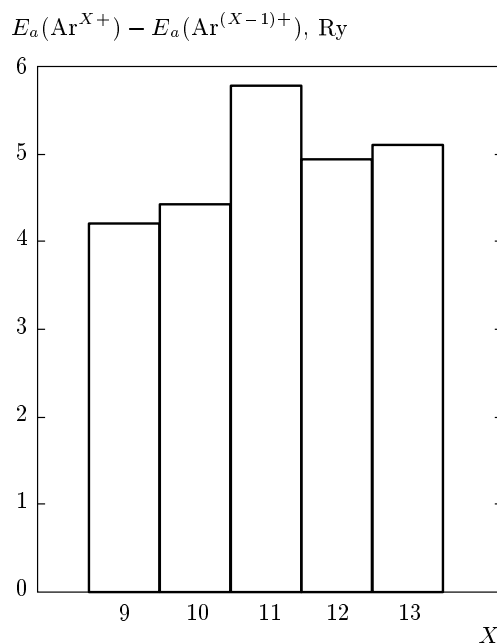


Рис. 8. Разность между потенциалами ионизации соседних ионов  $Ar^{X+}$  ( $X = 8, \dots, 13$ )

Как видно, результаты расчетов в рамках многочастичной модели туннельного эффекта хорошо согласуются с экспериментальными данными. Результаты, получаемые в рамках модели АДК, согласуются с экспериментом существенно хуже и зависят от кратности немонотонно.

Отметим следующий факт: для интерпретации экспериментальных результатов авторы работы [3] были вынуждены уменьшить интенсивность, используемую в модели АДК, в два раза. При использовании модели неупругого туннельного эффекта изменение интенсивности не требуется, как в рассматриваемом случае, либо такое изменение будет существенно меньшим (в работе [19] не более 5 %).

Превышение выхода ионов  $Ar^{12+}$  над  $Ar^{11+}$  при использовании модели АДК обусловлено двукратным различием максимальных значений их заселенности при одинаковых объемах, занимаемых этими ионами внутри фокальной области. Причиной такого неравномерного заселения зарядовых состояний в модели АДК является структура электронных спектров данных ионов. На рис. 8 показана разность между первыми потенциалами ионизации соседних невозбужденных ионов ( $Ar^{X+}$  и  $Ar^{(X-1)+}$ ). Эта разность монотонно растет с увеличением кратности ионизации. Исключение составляет ион  $Ar^{11+}$ . При такой кратности зависимость, представленная на рис. 8, достигает заметного максимума, что обу-

словлено существенным различием в структуре оболочек, заполненных более и менее, чем наполовину. В результате появляется уменьшение кулоновского предэкспоненциального множителя в выражении (1) для ионов  $\text{Ar}^{11+}$  в 1.5 раза по сравнению с ионом  $\text{Ar}^{10+}$ . Таким образом, заселенность  $\text{Ar}^{11+}$ , найденная в модели АДК, оказывается обедненной. Следствием данного факта является физически не вполне ясное превышение выхода ионов более высокой кратности над выходом ионов более низкой кратности. Такие аномалии представлены, например, в работах [3–5, 7]. Учет неупругих каналов устраняет подобные аномалии, поскольку в результате максимальные значения заселенности становятся приблизительно одинаковыми, а выход МЗИ в гауссовом пучке начинает монотонно убывать с ростом заряда ионов.

### 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты вычислений, приведенные в данной работе, а также в работах [18, 19], подтвержденные экспериментальными результатами [3, 23, 24], показывают, что основным механизмом, определяющим различие многочастичной и одночастичной моделей образования многозарядных ионов в лазерном поле, является неупругий туннельный эффект, существенный для всех реальных интенсивностей лазерного излучения, приводящих к образованию ионов с кратностью 2 и выше. На примере ионов  $\text{Ar}^{9+} \dots \text{Ar}^{13+}$ ,  $\text{Kr}^{19+} \dots \text{Kr}^{23+}$ ,  $\text{Rb}^{10+}$  и  $\text{Rb}^{11+}$  показано, что при интенсивности излучения, превышающей  $10^{17.5}$  Вт/см<sup>2</sup>, становится существенным коллективный двухэлектронный туннельный эффект, изменяющий полную вероятность образования ионов Rb до одного порядка и выход ионов Ar, Kr более, чем в два раза. Для сравнения укажем, что релятивистские эффекты изменяют вероятность туннельного эффекта на порядок в водородоподобных ионах лишь при  $Z \gtrsim 40$  [16]. Показано, что одночастичная и многочастичная модели могут приводить к качественному различию результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 08-02-00337).

### ПРИЛОЖЕНИЕ А

#### Ионные волновые функции

Рассматривая взаимодействие внешних  $d$  электронов иона с лазерным излучением, при кратности

ионизации  $Z \lesssim 20$  допустимо использовать приближение  $LS$ -связи. Состояние оболочки  $l^k$  ( $k \leq 10$ ) характеризуется набором квантовых чисел ( $aSLJM_J$ ). Здесь  $J$  и  $M_J$  — соответственно полный момент оболочки и его проекция (в данном случае ось квантования выбирается в направлении вектора поляризации лазерного излучения,  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ,  $\mathbf{L}$  и  $\mathbf{S}$  — соответственно полные орбитальный момент и спин),  $a$  — дополнительные квантовые числа для классификации многоэлектронных термов при  $l \geq 2$ . В случае  $d$ -оболочки  $a = v \leq k$  — так называемое старшинство электронной конфигурации. Оно представляет собой то минимальное количество электронов, для которого состояние с заданными квантовыми числами  $S, L$  появляется впервые. Вследствие сферической симметрии свободного атома, полная энергия оболочки не зависит от магнитного квантового числа  $M_J$ . Таким образом, энергия любого терма конфигурации  $l^k$  полностью определяется набором квантовых чисел ( $aSLJ$ ).

Пусть  $\mathbf{r}_q$  — радиус-вектор  $q$ -го электрона,  $\xi_q = (\mathbf{r}_q \sigma_q)$  — набор его пространственных и спиновых координат,  $\xi^{(k)} = (\xi_1, \dots, \xi_k)$  — совокупность координат в  $k$ -электронной конфигурации. Волновую функцию оболочки  $l^k$  в координатном представлении удобно строить с определенными значениями проекции полного спина  $M_S$  и полного орбитального момента  $M_L$ :

$$\langle \xi^{(k)} | l^k(aSL)M_S M_L \rangle. \quad (\text{A.1})$$

В одночастичном приближении волновая функция (A.1) выражается линейной комбинацией функции (A.1) оболочки  $l^{k-1}$ :

$$\begin{aligned} \langle \xi^{(k)} | l^k(aSL)M_S M_L \rangle &= R(r_k) Y_{l m_k}(\hat{\mathbf{r}}_k) \chi_{\mu_k}(\sigma_k) \times \\ &\times \sum_{a', S', L'} C_{S' M_{S'}, 1/2 \mu_k}^{S M_S} C_{L' M_{L'}, l m_k}^{L M_L} \times \\ &\times \langle l^{k-1}(a' S' L') l | l^k(aSL) \rangle \times \\ &\times \langle \xi^{(k-1)} | l^{k-1}(a' S' L') M_{S'} M_{L'} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Здесь  $R(r)$  — радиальная волновая функция,  $\chi(\sigma)$  — спиновая функция,  $\langle l^{k-1}(a' S' L') l | l^k(aSL) \rangle$  — генеалогический коэффициент. Их таблицы для  $k = 3 \dots 5$  впервые получены в работе [37]. Данные коэффициенты обеспечивают антисимметрию волновой функции относительно перестановки любой пары  $(\xi_i, \xi_j)$ . В конфигурации  $l^2$  генеалогические коэффициенты при четном  $S + L$  обращаются в единицу, а при нечетном — в нуль. Если же  $l$ -оболочка заполнена единственным электроном, то сумма в (A.2) обращается в единицу. При заданном  $k$  волновые функции (A.1) ортогональны и нормированы на единицу:

$$\begin{aligned} \langle l^k (a' S' L') M_{S' M_{L'}} | l^k (a S L) M_S M_L \rangle = \\ = \delta_{a' a} \delta_{S' S} \delta_{L' L} \delta_{M_{S'} M_S} \delta_{M_{L'} M_L}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Перечислим разрешенные наборы  $(aSL)$  для различных конфигураций  $p^k$  и  $d^k$  в спектроскопических обозначениях (старшинство указано слева внизу):

$$\begin{aligned} p^0: {}^1S; p^1: {}^2P; p^2: {}^3P, {}^1D, {}^1S; p^3: {}^4S, {}^2D, {}^2P; \\ d^0: {}^1S; d^1: {}^2D; d^2: {}^1_0S, {}^3P, {}^1D, {}^3F, {}^1G; d^3: {}^2P, {}^4P, \\ {}^2_1D, {}^2D, {}^2F, {}^4F, {}^2G, {}^2H; \\ d^4: {}^1_0S, {}^1S, {}^3_2P, {}^3P, {}^1_2D, {}^1D, {}^3D, {}^5D, {}^1F, {}^3_2F, {}^3F, \\ {}^1_2G, {}^1G, {}^3G, {}^3H, {}^1I; \\ d^5: {}^2S, {}^6S, {}^2_3P, {}^4_3P, {}^2_1D, {}^2_3D, {}^2D, {}^4D, {}^2_3F, {}^2F, {}^4_3F, \\ {}^2_3G, {}^2G, {}^4G, {}^2_3H, {}^2I. \end{aligned}$$

Если оболочка  $l^k$  заполнена более, чем наполовину ( $k = 2l + 2, 2l + 3, \dots, 4l + 2$ ), то для нее допустимы те же самые наборы  $(aSL)$ , что и для конфигурации  $l^{4l+2-k}$ . В этом случае генеалогические коэффициенты вычисляются по рекуррентной формуле [37]

$$\begin{aligned} \langle l^{k-1} (a' S' L') | l^k (a S L) \rangle = (-1)^{S+S'+L+L'-l+1/2} \times \\ \times \left[ \frac{4l+3-k}{k} \frac{2S'+1}{2S+1} \frac{2L'+1}{2L+1} \right]^{1/2} \times \\ \times \langle l^{4l+2-k} (a S L) | l^{4l+3-k} (a' S' L') \rangle. \end{aligned}$$

Состояния  $|l^k (aSL) J M_J\rangle$  получаются из (A.1) в

соответствии с правилом векторного сложения моментов:

$$\begin{aligned} |l^k (aSL) J M_J\rangle = \\ = \sum_{M_S, M_L} |l^k (aSL) M_S M_L\rangle C_{L M_L S M_S}^{J M_J}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

## ПРИЛОЖЕНИЕ В

### Интегралы перекрытия

Многочастичная структура ионных волновых функций входит в вероятность туннельной ионизации через квадрат интеграла перекрытия  $Q$ . Более удобным представляется вычисление интеграла перекрытия  $\tilde{Q}$  для туннельного  $N$ -электронного перехода из начального состояния с  $k$  электронами

$$|l^k (a_k S_k L_k) M_{S_k} M_{L_k}\rangle$$

в конечное состояние с  $k - N$  электронами

$$|l^{k-N} (a_{k-N} S_{k-N} L_{k-N}) M_{S_{k-N}} M_{L_{k-N}}\rangle$$

в представлении (A.1). Будем пренебрегать изменением волновых функций внутренних полностью замкнутых электронных оболочек<sup>2)</sup>.

При произвольных  $k$  и  $N$  выражение (A.2) последовательным  $N$ -кратным выполнением может быть представлено в виде разложения по базису функций  $\langle \xi^{(k-N)} | l^{k-N} (a_{k-N} S_{k-N} L_{k-N}) M_{S_{k-N}} M_{L_{k-N}} \rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle \xi^{(k)} | l^k (a_k S_k L_k) M_{S_k} M_{L_k} \rangle = \\ = \sum_{[(aSL) M_S M_L]_{k-N}} \sum_{\text{все } m\mu} \tilde{Q}_{\{l k N; [(aSL) M_S M_L]_{k-N}, [(aSL) M_S M_L]_k\}}^{(m_{k-N+1} \mu_{k-N+1}, \dots, m_k \mu_k)} \times \\ \times \prod_{q=k-N+1}^k R(r_q) Y_{lm_q}(\hat{\mathbf{r}}_q) \chi_{\mu_q}(\sigma_q) \langle \xi^{(k-N)} | l^{k-N} (a_{k-N} S_{k-N} L_{k-N}) M_{S_{k-N}} M_{L_{k-N}} \rangle. \end{aligned}$$

Здесь  $(m_q \mu_q)$  — набор проекций орбитальных и спиновых моментов у испускаемых электронов. Введено обозначение

$$[\alpha \beta \dots]_i \equiv (\alpha_i, \beta_i, \dots).$$

Коэффициенты разложения  $\tilde{Q}$  будут соответствующими интегралами перекрытия. Они сравнительно просто выражаются с помощью рекуррентного соотношения:

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{\{l k N; [(aSL) M_S M_L]_{k-N}, [(aSL) M_S M_L]_k\}}^{(m_{k-N+1} \mu_{k-N+1}, \dots, m_k \mu_k)} = \sum_{[aSL]_{k-N+1}} \langle l^{k-N} ([aSL]_{k-N}) d | l^{k-N+1} ([aSL]_{k-N+1}) \rangle \times \\ \times C_{L_{k-N} M_{L_{k-N}} l m_{k-N+1}}^{L_{k-N+1} M_{L_{k-N+1}}} C_{S_{k-N} M_{S_{k-N}} 1/2 \mu_{k-N+1}}^{S_{k-N+1} M_{S_{k-N+1}}} \tilde{Q}_{\{l k N-1; [(aSL) M_S M_L]_{k-N+1}, [(aSL) M_S M_L]_k\}}^{(m_{k-N+2} \mu_{k-N+2}, \dots, m_k \mu_k)}. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

<sup>2)</sup> В дальнейшем данное приближение «замороженных» внутренних оболочек будет использовано всюду.

При  $N = 0$  здесь предполагается, что

$$\tilde{Q}_{\{l k 0; [(aSL)M_S M_L]_k, [(aSL)M_S M_L]_k\}} = 1.$$

Величины (В.1) обладают следующими свойствами.

1) В соответствии с принципом Паули они изме-

няют знак после перестановки любой пары индексов  $(m_q \mu_q)$ , соответствующих испускаемым электронам:

$$\tilde{Q}_{\{\dots, m_i \mu_i, \dots, m_j \mu_j, \dots\}} = -\tilde{Q}_{\{\dots, m_j \mu_j, \dots, m_i \mu_i, \dots\}}. \quad (\text{В.2})$$

2) Соотношение ортогональности (А.3) приводит к выполнению следующего правила сумм:

$$\sum_{[(aSL)M_S M_L]_{k-N}} \sum_{\text{все } m \mu} [\tilde{Q}_{\{l k N; [(aSL)M_S M_L]_{k-N}, [(aSL)M_S M_L]_k\}}]^{(m_{k-N+1} \mu_{k-N+1}, \dots, m_k \mu_k)} = 1. \quad (\text{В.3})$$

Набор величин (В.1) можно табулировать с помощью любой системы компьютерной алгебры. Соотношения (В.2), (В.3) можно использовать для проверки результатов.

Интегралы перекрытия  $Q$  между состояниями  $|l^k(aSL)JM_J\rangle$  получаются из  $\tilde{Q}$  с помощью выражения (А.4). Пользуясь условием ортогональности коэффициентов Клебша–Гордана, получаем

$$[Q_{\{l k N; [(aSL)M_L J]_{k-N}, [(aSL)M_L J]_k\}}]^{(m_{k-N+1}, \dots, m_k)} = \sum_{(M_S M_J)_{k-N}} \sum_{(M_S M_J)_k} \sum_{\text{все } \mu} [C_{L_k M_L k}^{J_k M_J k} S_k M_S k]^2 \times \\ \times [C_{L_{k-N} M_L_{k-N}}^{J_{k-N} M_J_{k-N}} S_{k-N} M_S_{k-N}]^2 [\tilde{Q}_{\{l k N; [(aSL)M_S M_L]_{k-N}, [(aSL)M_S M_L]_k\}}]^{(m_{k-N+1} \mu_{k-N+1}, \dots, m_k \mu_k)}. \quad (\text{В.4})$$

Поскольку вероятность туннельной ионизации не зависит от проекции спина, в формуле (В.4) выполнено суммирование по соответствующим квантовым числам.

Таким образом, для вычисления интегралов перекрытия в приближении «замороженного» остова достаточно использовать основной формализм теории углового момента. Значения генеалогических коэффициентов целесообразно брать из первоисточника [37], поскольку в существующих монографиях (см., например, [38]) они приведены с опечатками.

## ЛИТЕРАТУРА

1. E. A. Chowdhury, C. P. J. Barty, and B. C. Walker, *Phys. Rev. A* **63**, 042712 (2001).
2. M. Dammasch, M. Dörr, U. Eichmann, E. Lenz, and W. Sandner, *Phys. Rev. A* **64**, 061402 (2001).
3. K. Yamakawa, Y. Akahane, Y. Fukuda, M. Aoyama, N. Inoue, and H. Ueda, *Phys. Rev. A* **68**, 065403 (2003).
4. K. Yamakawa, Y. Akahane, Y. Fukuda, M. Aoyama, N. Inoue, H. Ueda, and T. Utsumi, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 123001 (2004).
5. E. Gubbini, U. Eichmann, M. P. Kalashnikov, and W. Sandner, *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **38**, L87 (2005).

6. S. Palaniyappan, A. DiChiara, I. Ghebregziabher, E. L. Huskins, A. Falkowski, D. Pajeroski, and B. C. Walker, *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **39**, S357 (2006).
7. E. Gubbini, U. Eichmann, M. P. Kalashnikov, and W. Sandner, *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.* **39**, S381 (2006).
8. A. D. DiChiara, I. Ghebregziabher, R. Sauer, J. Waesche, S. Palaniyappan, B. L. Wen, and B. C. Walker, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 173002 (2008).
9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Физматлит, Москва (2000).
10. М. Ю. Кучиев, *Письма в ЖЭТФ* **45**, 319 (1987).
11. P. V. Corkum, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1994 (1993).
12. Л. В. Келдыш, *ЖЭТФ* **47**, 1945 (1964).
13. Б. М. Смирнов, М. И. Чибисов, *ЖЭТФ* **49**, 841 (1965).
14. А. М. Переломов, В. С. Попов, М. В. Терентьев, *ЖЭТФ* **50**, 1393 (1966).
15. М. В. Аммосов, Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, *ЖЭТФ* **91**, 2008 (1986).
16. N. Milosevic, V. P. Krainov, and T. Brabec, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 193001 (2002).
17. В. С. Попов, Б. М. Карнаков, В. Д. Мур, С. Г. Поздняков, *ЖЭТФ* **129**, 871 (2006).



18. A. S. Kornev, E. B. Tulenko, and B. A. Zon, Phys. Rev. A **68**, 043414 (2003).
19. A. S. Kornev, E. B. Tulenko, and B. A. Zon, Phys. Rev. A **69**, 065401 (2004).
20. Б. А. Зон, ЖЭТФ **118**, 1041 (2000).
21. Б. А. Зон, ЖЭТФ **116**, 410 (1999).
22. U. Eichmann, M. Dörr, M. Maeda, W. Becker, and W. Sandner, Phys. Rev. Lett. **84**, 3550 (2000).
23. D. N. Fittinghoff, P. R. Bolton, B. Chang, and K. C. Kulander, Phys. Rev. A **49**, 2174 (1994).
24. W. A. Bryan, S. L. Stebbings, J. McKenna et al., Nature Phys. **2**, 379 (2006).
25. A. S. Kornev, E. B. Tulenko, and B. A. Zon, Phys. Rev. A **79**, 063405 (2009).
26. R. Taïeb, V. Vénierard, and A. Maquet, Phys. Rev. Lett. **87**, 053002 (2001).
27. E. Gubbini, U. Eichmann, M. P. Kalashnikov, and W. Sandner, Phys. Rev. Lett. **94**, 053602 (2005).
28. Ch. Jungen, *Molecular Applications of Quantum Defect Theory*, Institute of Phys., Bristol (1996).
29. V. E. Chernov, D. L. Dorofeev, I. Yu. Kretinin, and B. A. Zon, Phys. Rev. A **71**, 022505 (2005).
30. T. A. Carlson, Phys. Rev. **156**, 147 (1967).
31. A. S. Kornev, I. Yu. Kretinin, and B. A. Zon, Laser Phys. **19**, 231 (2009).
32. Yu. Ralchenko, A. E. Kramida, J. Reader, and NIST ASD Team, *NIST Atomic Spectra Database (version 3.1.5)*, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (2008); <http://physics.nist.gov/asd3>.
33. W. A. Bryan, S. L. Stebbings, E. M. L. English, T. R. J. Goodworth, W. R. Newell, J. McKenna, M. Suresh, B. Srigengan, I. D. Williams, I. C. E. Turcu, J. M. Smith, E. J. Divall, C. J. Hooker, and A. J. Langley, Phys. Rev. A **73**, 013407 (2006).
34. M. A. Walker, P. Hansch, and L. D. Van Woerkum, Phys. Rev. A **57**, R701 (1998).
35. A. l'Huillier, L. A. Lompre, G. Mainfray, and C. Manus, Phys. Rev. A **27**, 2503 (1983).
36. A. A. Sorokin, S. V. Bobashev, T. Feigl, K. Tiedtke, H. Wabnitz, and M. Richter, Phys. Rev. Lett. **99**, 213002 (2007).
37. G. Racah, Phys. Rev. **63**, 367 (1943).
38. И. И. Собельман, *Введение в теорию атомных спектров*, Физматлит, Москва (1963).