

Effekter af faseforskellen mellem bærebølgen og
indhyldningsfunktionen i stærkfeltsionisation af H og
 H^- med korte pulser

Christian Per Juul Martiny

28. august 2005

Bachelorprojekt i fysik

Institut for Fysik og Astronomi

Århus universitet

Indhold

1	Indledning	2
2	Volkov bølgefunktionen og vekselvirkningsoperatorerne	4
2.1	Volkov bølgefunktionen	4
2.2	Diskusion af vekselvirkningsoperatorerne	6
3	Adiabatisk teori	6
4	Stærkfeltsionisation af H med en kort puls	9
4.1	Overgangsamplituden	9
4.2	Volkov approksimationen til Ψ_f^-	11
4.3	Coulomb-Volkov approksimationen til Ψ_f^-	13
5	Stærkfeltsionisation af H^- med en kort puls	15
5.1	Indledende kommentarer	15
5.2	Grundtilstanden	16
5.3	Overgangsamplituden	17
6	Resultater	17
6.1	Indledende kommentarer	17
6.2	Hydrogen i et lineært polariseret laserfelt	18
6.2.1	E-feltet	18
6.2.2	ATI-spektre	19
6.2.3	CEPD-effekter	21
6.3	Hydrogen i et cirkulært polariseret laserfelt	23
6.3.1	E-feltet	23
6.3.2	Resultater med \vec{E}_1	24
6.3.3	Resultater med \vec{A}_2	26
6.4	H^- i et cirkulært polariseret laserfelt	27
7	Konklusion	28

1 Indledning

I 1980'erne blev laserteknologien revolutioneret, da det blev muligt at bygge lasere med en pulslængde af størrelsesordenen femtosekunder (10^{-15} s). Siden er der blevet forsket intensivt i at skabe endnu kortere pulser. Rent videnskabeligt er en sådan laser meget interessant, da den både giver nye fysik effekter, samt muliggør studier af tidsudviklinger i størrelsesordenen femtosekunder.

Som et eksempel ser vi på en kemisk reaktion. En typisk undersøgelse af denne reaktion vil kun fortælle hvilke stoffer der dannes og ikke hvordan de dannes, i hvert fald ikke på atomart niveau. En undersøgelse af en sådan reaktion på atomart niveau kan foretages med en laser. Tidsskalaen for en kemisk reaktion er dog i størrelsesordenen fs, og derfor er det nødvendigt at bruge en fs-laser.

Hvis man ønsker at undersøge elektronbevægelser i f.eks et atom, slår selv fs-lasere ikke til. Et meget groft mål for tidsskalaen for elektron bevægelser i et atom er nemlig svingningstiden for elektronen (i grundtilstanden) i N. Bohrs model for hydrogen fra 1913. Denne er givet ved,

$$T = \frac{2\pi a_0}{\alpha c} \approx 150 \cdot 10^{-18} \text{sekunder} \quad (1)$$

hvor a_0 er Bohr radius, α er finstrukturkonstanten og c er lysets hastighed i vakuum. I den seneste tid er det dog blevet muligt at lave laserlys med en pulslængde i størrelsesordenen attosekunder (10^{-18} s) [1]. Disse pulser er så korte, at det sandsynligvis er muligt at undersøge elektron bevægelserne i et atom ved hjælp af dem.

En lang monokromatisk laserpuls er fuldstændigt karakteriseret ved dens frekvens, amplitude og polarisationsvektor. En kort laserpuls kræver derimod flere parametre. Betragt for eksempel pulsen beskrevet ved følgende vektorpotential,

$$\vec{A}(t) = -\frac{\epsilon_0}{\omega} \sin\left(\omega\left(t - \frac{\tau}{2}\right) + \phi\right) \hat{e} \quad t \in [0; \tau] \quad (2)$$

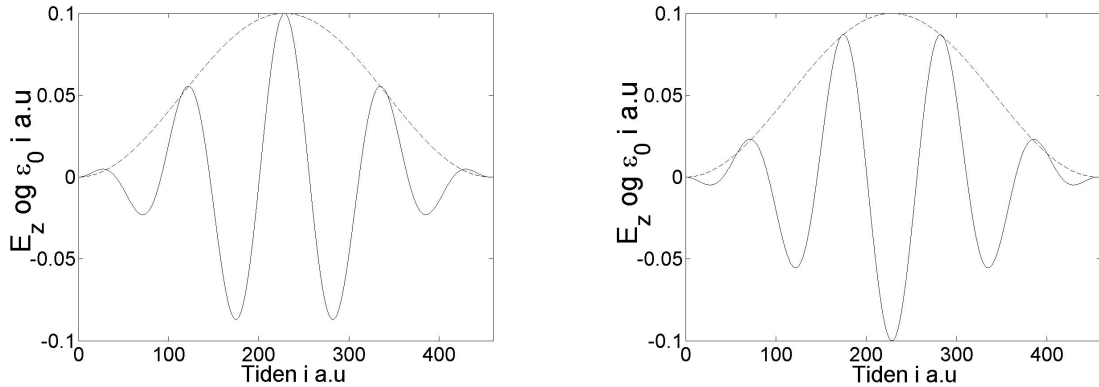
Her er ω vinkelfrekvensen, τ er pulslængden, \hat{e} er polarisationsvektoren, og ϵ_0 er indhyldningsfunktionen. Denne er givet ved,

$$\epsilon_0(t) = E_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) \quad (3)$$

hvor E_0 er den maksimale feltstyrke. Størrelsen ϕ er faseforskellen mellem bærebølgen og indhyldningsfunktionen for det elektriske felt. Tallet ϕ angiver altså faseforskellen mellem maksimum for det elektriske felt, og indhyldningsfunktionens maksimum. Dette er illustreret i figur 1¹. I dette projekt benytter vi den engelske forkortelse CEPD² som betegnelse for ϕ . Den engelske forkortelse bruges, fordi størstedelen af litteraturen benytter denne betegnelse. For en kort puls vil en ændring af CEPD dramatisk ændre pulsens rumlige form, som illustreret i figur 1. Dette betyder, at alle fysiske processer induceret af pulsen også afhænger af CEPD. Derfor er det vigtigt at kunne bestemme CEPD for en given puls.

¹Fra nu af benytter vi atomare enheder, med mindre andet er nævnt.

²Carrier-envelope phase difference.



Figur 1: E_z (den fuldt optrukne kurve) og ϵ_0 (den stiplede kurve) som funktion af tiden. I venstre graf er $\phi = 0$, mens højre graf har $\phi = \pi$

Betragt nu stærkfeltsionisation af brint via laserpulsens beskrevet ved (2). I det klassiske billede vil feltet påvirke elektronen med kraften,

$$\vec{F} = -\vec{E} \quad (4)$$

For $\phi = 0$ vil,

$$\vec{F}(t_{max}) = -E_{max}\hat{e} \quad (5)$$

mens vi for $\phi = \pi$ har,

$$\vec{F}(t_{max}) = E_{max}\hat{e} \quad (6)$$

Her er t_{max} det tidspunkt, hvor indhyldningskurven har maksimum, og \hat{e} er polarisationsvektoren. For $\phi = 0$ vil spidsbelastningen på elektronen altså være antiparallel med \hat{e} , mens spidsbelastningen på elektronen vil være parallel med \hat{e} for $\phi = \pi$. Dette indikerer, at fotoelektronens angulære fordeling afhænger af CEPD. En lang puls indeholder dog så mange cykler, at vi må forvente at denne effekt forsvinder. En analyse af brint vekselvirkende med en intens laserpuls med få cykler, baseret på Schrødingers ligning, viser netop sådanne CEPD effekter[2]. I dette bachelorprojekt ser vi på stærkfeltsionisation af brint og H^- med korte laserpulser, og undersøger hvordan den angulære fordeling af fotoelektroner afhænger af CEPD. Vores fremgangsmåde bygger ikke på Schrødingers ligning, men istedet på numerisk beregning af ionisationssandsynligheden pr vinkel pr energi i Volkov hhv. Coulomb-Volkov approksimationen (Se kap. 4 og kap. 5). Beregningerne er gennemført for både lineært og cirkulært polariseret pulser.

I kapitlerne 2 til 5 udvikler vi den nødvendige teori, mens de numeriske beregninger er gennemgået i kapitel 6.

2 Volkov bølgefunktionen og vekselvirkningsoperatorene

I dette kapitel beregner vi bølgefunktionen for en elektron i et elektromagnetisk felt. Derudover diskutere vi flere forskellige måde, at repræsentere vekselvirkningen med feltet på.

2.1 Volkov bølgefunktionen

Betragt en elektron som vekselvirker med et elektromagnetisk felt. Vi får gentagne gange senere brug for bølgefunktionen for dette system, og ønsker derfor at beregne denne. Vi ved fra analytisk mekanik, at Hamiltonfunktionen for systemet er[3],

$$H = \frac{(\vec{p} + \vec{A}(\vec{r}, t))^2}{2} - V \quad (7)$$

hvor V er skalarpotentialet, og \vec{A} er vektorpotentialet beskrivende feltet. Vi vælger at arbejde i Coulomb gauge, $\nabla \cdot \vec{A} = 0$. Poissons ligning fortæller straks, at skalarpotentialet er nul. Dvs:

$$H = \frac{(\vec{p} + \vec{A}(\vec{r}, t))^2}{2} \quad (8)$$

Hamiltonoperatoren får da følgende form, idet vi antager dipol-approximationen.³

$$\hat{H}_v = \frac{(\hat{p} + \vec{A}(t))^2}{2} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \vec{A}(t) \cdot \hat{p} + \frac{\vec{A}(t)^2}{2} \quad (9)$$

Operatoren \hat{H}_v kan, via den unitære transformation $\hat{T}_l = \exp(i\vec{r} \cdot \vec{A}(t))$, bringes på formen[4]⁴.

$$\hat{H}_l = \hat{T}_l \hat{H}_v = \frac{\hat{p}^2}{2} + \vec{r} \cdot \vec{E} \quad (10)$$

Repræsenterer vi vekselvirkningen ved \hat{H}_v , taler vi om hastigheds gauge, mens beskrivelsen ved \hat{H}_l kaldes for længde gauge. Det kan vises, at kvantemekanik er gauge-invariant [4]. Vi kan altså frit vælge hvilken gauge, som vi ønsker at benytte. Som vi skal se senere, er dette ikke korrekt, hvis vi benytter approksimationer.

Lad os først se på problemet i hastigheds gauge. Ifølge den tidsafhængige Schrödinger ligning er,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = \frac{\hat{p}^2}{2} \psi(\vec{r}, t) + \vec{A}(t) \cdot \hat{p} \psi(\vec{r}, t) + \frac{\vec{A}(t)^2}{2} \psi(\vec{r}, t) \quad (11)$$

³Da vekselvirkningen mellem elektronen og feltet kun finder sted indenfor et område af samme størrelsesorden som et atom, er dette som regel en god approksimation. Dipol-approximationen vil stilsigende blive brugt i resten af teksten.

⁴Bemærk, at dette er kun er rigtigt, hvis vi benytter dipol-approximationen.

idet vi benytter ovenstående. Definer nu ψ_V^v ved,

$$\psi_V^v(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp \left[i\vec{q} \cdot \vec{r} - i\frac{q^2}{2}t - i \int_0^t \vec{A}(t) \cdot \vec{q} dt - i \int_0^t \frac{\vec{A}(t)^2}{2} dt \right] \quad (12)$$

hvor \vec{q} er elektronens impuls. Da

$$\begin{aligned} i\frac{\partial}{\partial t}\psi_V^v(\vec{r}, t) &= \frac{i}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\frac{\partial}{\partial t} \exp \left[i\vec{q} \cdot \vec{r} - i\frac{q^2}{2}t - i \int_0^t \vec{A}(t) \cdot \vec{q} dt - i \int_0^t \frac{\vec{A}(t)^2}{2} dt \right] \\ &= \frac{i}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp \left[i\vec{q} \cdot \vec{r} - i\frac{q^2}{2}t - i \int_0^t \vec{A}(t) \cdot \vec{q} dt - i \int_0^t \frac{\vec{A}(t)^2}{2} dt \right] \\ &\quad \times \left(-i\frac{q^2}{2} - i\vec{A}(t) \cdot \vec{q} - i\frac{\vec{A}(t)^2}{2} \right) \\ &= \left(\frac{q^2}{2} + \vec{A}(t) \cdot \vec{q} + \frac{\vec{A}(t)^2}{2} \right) \psi_V^v(\vec{r}, t) \\ &= \hat{H}_v \psi_V^v(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (13)$$

ser vi, at ψ_V^v er en løsning til den tidsafhængige Schrödinger ligning. Bølgefunktionen for en fri partikel i et elektromagnetisk felt kaldes for en Volkov bølge, efter D. M. Volkov[5]. Ovenstående differentiation viser, at ψ_V^v er Volkov bølgen i hastigheds gauge.

Lad os nu se på det samme problem i længde gauge. Da vi kender Volkov-bølgen i hastigheds gauge, kender vi naturligvis også Volkov-bølgen i længde gauge. Vi skal jo bare benytte \hat{T}_l . Funktionen,

$$\begin{aligned} \psi_V^l(\vec{r}, t) &= T_l \psi_V^v(\vec{r}, t) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp \left(i(\vec{q} + \vec{A}(t)) \cdot \vec{r} - \frac{i}{2} \int_0^t (\vec{q} + \vec{A}(t'))^2 dt' \right) \end{aligned} \quad (14)$$

er altså Volkov bølgen i længde gauge.

Lad os kort diskutere en tredje måde at repræsentere Volkov-bølgen på. Betragt følgende Hamiltonoperator,

$$\hat{H} = \frac{(\hat{p} + \vec{A}(t))^2}{2} + V(\vec{r}) \quad (15)$$

som beskriver en elektron, som vekselvirker dels med potentialet V dels med et elektromagnetisk felt. Via en unitær transformation kan \hat{H} binges på formen[4],

$$\hat{H}' = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(\vec{r} - \vec{\alpha}(t)) \quad (16)$$

hvor

$$\vec{\alpha}(t) = \int^t \vec{A}(t) dt \quad (17)$$

Denne beskrivelse kaldes for Kramer-Hennerberger frame, og er ligesom tidligere fuldstændigt ækvivalent med den oprindelige [4]. Schrødingers ligningen for en fri elektron i et laserfelt har da formen,

$$\hat{H}_{\text{KH}} = \frac{\hat{p}^2}{2} \quad (18)$$

i Kramer-Hennerberger frame. Volkov-bølgen i Kramer-Hennerberger frame er altså en almindelig plan bølge.

$$\psi_{\text{KH}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp \left[i\vec{q} \cdot \vec{r} - i\frac{q^2 t}{2} \right] \quad (19)$$

2.2 Diskussion af vekselvirkningsoperatorerne

Vi har nu tre mulige måder at repræsentere Volkov-bølgen på. Hvis vi regnede eksakt ville de alle tre være ækvivalente og vi ville typisk vælge den, rent matematisk set, mest simple. Volkov-bølgen i Kramer-Hennerberger frame er matematisk noget simple end de to andre. Kramer-Hennerberger frame har dog en stor ulempe. Lys-atom vekselvirkningen repræsenteres i Kramer-Hennerberger frame af den ikke særligt pæne operator,

$$H_{\text{LA}} = V(\vec{r} - \vec{\alpha}(t)) \quad (20)$$

som blander det atomare potential med feltet og hvor der er muligheder for singulariteter. Da dette kan give problemer senere, er Volkov bølgen i Kramer-Hennerberger frame ikke den rette beskrivelse for os.

Vi sammenligner nu de to gauge beskrivelser. Operatoren $\vec{E} \cdot \vec{r}$ har naturligvis størst effekt for r stor, mens operatoren $\vec{A} \cdot \hat{p}$ har størst effekt for r lille. Det sidste kan forklares på følgende måde. Operatoren \hat{p} er en differentialoperator, og bølgefunktionen har størst variation for r lille. Dette betyder, at $\vec{A} \cdot \hat{p}$ har størst effekt for r lille, da \vec{A} ikke afhænger af stedet. Længde gauge fremhæver altså store r , mens hastigheds gauge fremhæver små r . Man siger, at længde gauge prober store r , mens hastigheds gauge prober små r . Hvis man benytter en approksimation som er bedst for store r , bør man derfor benytte længde gauge. Senere i dette projekt bruger vi netop approksimationer, som er bedst for store r , og vi skal derfor benytte længde gauge.

3 Adiabatisk teori

I dette kapitel undersøger vi om CEPD-effekter kan beskrives ved hjælp af en såkaldt adiabatisk teori. Her approksimeres E-feltet med et monokromatisk felt.

Betragt et atom eller en negativ ion som vekselvirker med en intens laserpuls. Vi er interesseret i processen, hvor en valenselektron frigøres fra atomet. Ideen er nu, at forsøge at beskrive E-feltet ved udtrykket,

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 \cos(\omega t + \phi) \quad (21)$$

hvor ω er vinkelfrekvensen, ϕ er CEPD og \vec{E}_0 er passende konstant fundet på følgende måde:

Lad pulslængden være τ . Vi udvælger nu en række tider $0 \leq t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_n = \tau$, og for hvert t_j bestemmes $\vec{E}(t_j)$. Konstanten \vec{E}_0 sættes nu til middelværdien af disse.

Vi erstatter altså E-feltet hørende til vores puls, med et periodisk E-felt som er tilstede til alle tider. Fordelen ved dette er, at vekselvirkningsoperatoren $\vec{r} \cdot \vec{E}$ nu er periodisk. Metoden har vist sig effektiv til at beskrive rimelig korte pulser [6].

Det kan vises, at den differentielle ionisationssandsynlighed pr tid er givet ved [7]⁵,

$$dw = 2\pi \sum_n |A_{\vec{p}n}|^2 \delta(E_{\vec{p}} - E_b - n\omega) \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \quad (22)$$

hvor \vec{p} er fotoelektronens impuls, $E_{\vec{p}}$ er fotoelektronens energi, E_b er elektronens bindingsenergi, og $A_{\vec{p}n}$ er,

$$A_{\vec{p}n} = \frac{1}{T} \int_0^T \langle \Psi_{\vec{p}} | V | \Psi_0 \rangle dt \quad (23)$$

Her er $\Psi_0(\vec{r}, t) = \exp(-iE_b t) \Phi_0(\vec{r})$ elektronens initiale bølgefunktion. Altså den bundne tilstand i atomet. Operatoren V er vekselvirkningsoperatoren,

$$V = V(t) = \vec{r} \cdot \vec{E}(t) \quad (24)$$

i længde gauge. Funktionen $\Psi_{\vec{p}}$ er den frigjorde elektrons bølgefunktion, og T er E-feltets svigningstid. Delta funktionen i (22) udtrykker energibevarelse.

Hvis feltet er stærkt, kan vi til en vis grad se bort fra vekselvirkningen mellem det ioniserede atom og fotoelektronen. Så er $\Psi_{\vec{p}}$ givet ved en Volkov bølgefunktion i længde gauge.

$$\Psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp(i(\vec{p} + \vec{A}(t)) \cdot \vec{r} - \frac{i}{2} \int_0^t (\vec{p} + \vec{A}(t'))^2 dt') \quad (25)$$

Bemærk at denne approksimation er bedst for store r , hvilket motiverer brugen af længde gauge.

Spørgsmålet er nu om normkvadratet, af $A_{\vec{p}n}$ er følsom over for CEPD. Hvis ikke, vil dw heller ikke være det, også kan teorien ikke benyttes til at beskrive CEPD effekter. Følgende argument viser netop, at normkvadratet af $A_{\vec{p}n}$ ikke afhænger af CEPD.

Sæt $\tau = \omega t + \phi$. Vi har så, at

$$\begin{aligned} \Psi_0(\vec{r}, t) &= \exp(-iE_b t) \Phi_0(\vec{r}) \\ &= \exp\left(-i\frac{E_b}{\omega}(\tau - \phi)\right) \Phi_0(\vec{r}) \\ &= \exp\left(-i\frac{E_b}{\omega}\tau\right) \Phi_0(\vec{r}) \exp\left(i\frac{E_b}{\omega}\phi\right) \end{aligned} \quad (26)$$

⁵Her er det essentielt, at vekselvirkningsoperatoren er periodisk.

og

$$\begin{aligned}
(2\pi)^{\frac{3}{2}}\Psi_{\vec{p}}^* &= \exp\left(-i(\vec{p} + \vec{A}(t)) \cdot \vec{r} + \frac{i}{2} \int_0^t (\vec{p} + \vec{A}(t'))^2 dt'\right) \\
&= \exp\left(-i\left(\vec{p} - \frac{1}{\omega}\vec{E}_0 \sin(\tau)\right) \cdot \vec{r} + \frac{i}{2\omega} \int_{\phi}^{\tau} \left(\vec{p} - \frac{1}{\omega}\vec{E}_0 \sin(\tau')\right)^2 d\tau'\right) \\
&= \exp\left(-i\left(\vec{p} - \frac{\vec{E}_0}{\omega} \sin(\tau)\right) \cdot \vec{r} + \frac{i}{2\omega} p^2 \tau - \frac{i}{2\omega} p^2 \phi\right) \\
&\quad \times \exp\left(-\frac{i}{\omega^2} \vec{p} \cdot \vec{E}_0 \left[-\cos(\tau')\right]_{\phi}^{\tau} + \frac{iE_0^2}{4\omega^3} \left[\tau' - \sin(\tau') \cos(\tau')\right]_{\phi}^{\tau}\right) \\
&= \exp(-ig(\phi)) F(\vec{r}, \tau)
\end{aligned} \tag{27}$$

Her er,

$$g(\phi) = \frac{p^2}{2\omega} \phi + \frac{\vec{p} \cdot \vec{E}_0}{\omega^2} \cos(\phi) + \frac{E_0^2}{4\omega^3} (\phi - \sin(\phi) \cos(\phi)) \tag{28}$$

$$\begin{aligned}
F(\vec{r}, \tau) &= \exp\left(-i\left(\vec{p} - \frac{1}{\omega}\vec{E}_0 \sin(\tau)\right) \cdot \vec{r} + \frac{i}{2\omega} p^2 \tau + \frac{i}{\omega^2} \vec{p} \cdot \vec{E}_0 \cos(\tau)\right) \\
&\quad \times \exp\left(i\frac{E_0^2}{4\omega^3} (\tau - \sin(\tau) \cos(\tau))\right)
\end{aligned} \tag{29}$$

Alt dette indsættes nu i udtrykket for $A_{\vec{p}n}$, og vi får derved følgende.

$$\begin{aligned}
A_{\vec{p}n} &= \frac{1}{T} \int_0^T \int \Psi_{\vec{p}}^* V \Psi_0 d^3 r dt \\
&= \frac{1}{T\omega(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp(-ig(\phi)) \exp(i\frac{E_b}{\omega} \phi) \\
&\quad \times \int_{\phi}^{2\pi+\phi} \int F(\vec{r}, \tau) V(\tau) \exp\left(-i\frac{E_b}{\omega} \tau\right) \Phi_0(\vec{r}) d\vec{r} d\tau
\end{aligned} \tag{30}$$

Lad os nu se lidt nærmere på integranden. Hvis vi kan vise, at denne er 2π periodisk er vi færdige. Integranden betegnes i det følgende med I . Det ses let, at

$$I = \exp\left(\frac{i}{2\omega} p^2 \tau + \frac{iE_0^2}{4\omega^3} \tau\right) f(\vec{r}, \tau) \exp\left(-i\frac{E_b}{\omega} \tau\right) \tag{31}$$

hvor f er en 2π periodisk funktion i τ . Ifølge energibevarelse skal $E_{\vec{p}} = E_b + n\omega$, hvor n er et naturligt tal. Det kan vises, at $E_{\vec{p}} = \frac{p^2}{2} + U_p = \frac{p^2}{2} + \frac{E_0^2}{4\omega^2}$. Størrelsen U_p kaldes for det ponderomotoriske potential, og beskriver elektronens vekselvirkning med det oscilerende felt. Heraf følger:

$$\begin{aligned}
\exp\left(\frac{i}{2\omega} p^2 \tau + \frac{iE_0^2}{4\omega^3} \tau - i\frac{E_b}{\omega} \tau\right) &= \exp\left(i\left(\frac{E_{\vec{p}}}{\omega} - \frac{E_b}{\omega}\right) \tau\right) \\
&= \exp(in\tau)
\end{aligned} \tag{32}$$

Dette viser, at I er periodisk med periode 2π . Heraf følger,

$$A_{\vec{p}n} = \frac{1}{T\omega(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp(-ig(\phi)) \exp(-i\frac{E_b}{\omega}\phi) \int_0^{2\pi} \int \exp(in\tau) f(\vec{r}, \tau) d\vec{r} d\tau \quad (33)$$

Nu ses det nemt, at normkvadratet af $A_{\vec{p}n}$ ikke afhænger af CEPD, da g er en reelle funktion. Dette resultat fortæller os, at vi ikke kan beskrive CEPD effekter v.h.a ovenstående. De midler simplethen ud. Det er egentligt ikke så mærkelig, fordi CEPD-effekter netop skyldes, at indhyldningskurven variere meget indenfor en enkelt cykel. Derfor kan vi ikke approksimere E-feltet med (21), som jo er tilstede til alle tider.

Vi er altså nødt til, at beskrive pulsen mere eksplicit. I de næste to kapitler vil vi netop gøre dette. Først for brint og derefter for den negative hydrogenionen. Både lineært og cirkulært polariseret laserpulser vil blive behandlet.

4 Stærkfeltsionisation af H med en kort puls

I sidste kapitel viste vi, at en adiabatisk teori ikke kan beskrive CEPD effekter. Det er altså nødvendigt at beskrive pulsen mere præcist. I dette kapitel ser vi netop på en mere tidseksPLICIT teori for brint.

4.1 Overgangsamplituden

Vi ser på et brint atom som vekselvirker med en intens laserpuls med få cykler, som antages beskrevet ved E-feltet \vec{E} . Lad os antage at tidsaksen er valgt så, $\vec{E}(t) = \vec{0}$ for $t \leq 0$ og $t \geq \tau$, hvor τ er pulslængden. Vi skal senere komme ind på den eksplicitte form af E-feltet, men indtil videre gør vi det generelt. Den tidsafhængige Schrödinger ligning for dette system har følgende form.

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) = (H_0 + V_l)\Psi(\vec{r}, t) \quad (34)$$

Her er \vec{r} elektronens stedvektor m.h.t protonen, og

$$H_0 = -\frac{\nabla^2}{2} - \frac{1}{r} \quad (35)$$

er den atomare hamiltonoperator, V_l repræsenterer vekselvirkningen med feltet. Dvs.

$$V_l(t) = \vec{r} \cdot \vec{E} \quad (36)$$

i længde gauge. Til start(før atomet mærker pulsen) antages atomet, at være i grundtilstanden. Denne er som bekendt givet ved,

$$\psi_i(\vec{r}, t) = \varphi_i(\vec{r}) \exp(-i\epsilon_i t) = \frac{e^{-r}}{\sqrt{\pi}} \exp(-i\epsilon_i t) \quad (37)$$

hvor $\epsilon_i = -0.5$ a.u er grundtilstandsenergien. Vi ønsker nu, at beregne ionisationssandsynligheden, eller rettere ionisationssandsynligheden pr vinkel pr energi.

Systemets tilstand efter pulsen er således en indgående kontinuums bølgefunktion for brint. Denne er givet ved [8],

$$\psi_f(\vec{r}, t) = \varphi_f(\vec{r}) \exp(-i\epsilon_f t) \quad (38)$$

hvor

$$\varphi_f(\vec{r}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{\pi\nu}{2}\right) \Gamma(1 + i\nu) \exp(i\vec{p} \cdot \vec{r}) F(-i\nu; 1; -ipr - i\vec{p} \cdot \vec{r}) \quad (39)$$

Her er \vec{p} fotoelektronens impuls, $\epsilon_f = \frac{p^2}{2}$ er fotoelektronens slutenergi, og $\nu = \frac{1}{p}$. Funktionen F er en konfluent hypergeometrisk funktion [9].

$$F(a; b; z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(a)_k z^k}{(b)_k k!} \quad (40)$$

Overgangsamplitude fra tilstand i ved $t = -\infty$ til tilstanden f ved $t = \infty$ kan beregnes som [8],

$$T_{fi} = \int (\Psi_f^-(\vec{r}, t))^* \Psi_i^+(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (41)$$

hvor $\Psi_f^-(\vec{r}, t)$ og $\Psi_i^+(\vec{r}, t)$ er løsninger til (34) som opfylder at,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Psi_f^-(\vec{r}, t) = \psi_f(\vec{r}, t) \quad (42)$$

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \Psi_i^+(\vec{r}, t) = \psi_i(\vec{r}, t) \quad (43)$$

Det kan vises at [8],

$$\begin{aligned} T_{fi} &= \lim_{t \rightarrow -\infty} \int (\Psi_f^-(\vec{r}, t))^* \Psi_i^+(\vec{r}, t) d\vec{r} \\ &= \lim_{t \rightarrow -\infty} \int (\Psi_f^-(\vec{r}, t))^* \psi_i(\vec{r}, t) d\vec{r} \end{aligned} \quad (44)$$

idet vi benytter betingelse (43). Vi bruger nu, at bølgefunktionerne ψ_f og ψ_i er ortogonale samt (42). Herved fås,

$$\begin{aligned} T_{fi} &= \lim_{t \rightarrow -\infty} \int (\Psi_f^-(\vec{r}, t))^* \psi_i(\vec{r}, t) d\vec{r} - \lim_{t \rightarrow \infty} \int (\Psi_f^-(\vec{r}, t))^* \psi_i(\vec{r}, t) d\vec{r} \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} \int (\Psi_f^-(\vec{r}, t))^* \psi_i(\vec{r}, t) d\vec{r} dt \end{aligned} \quad (45)$$

Dette kan bringes på endnu pænere form. Ifølge den tidsafhængige Schrödinger ligning vil,

$$\begin{aligned} -i \frac{\partial}{\partial t} (\Psi_f^-(\vec{r}, t))^* &= (H_0 + V_i) (\Psi_f^-(\vec{r}, t))^* \\ i \frac{\partial}{\partial t} \psi_i &= H_0 \psi_i \end{aligned} \quad (46)$$

Idet vi nu benytter dette, samt at H_0 er hermitisk, får vi følgende resultat.

$$\begin{aligned}
T_{fi} &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} \int (\Psi_f^-(\vec{r}, t))^* \psi_i(\vec{r}, t) d\vec{r} dt \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} \int \left(\frac{\partial \Psi_f^{-*}}{\partial t} \psi_i + \Psi_f^{-*} \frac{\partial \psi_i}{\partial t} \right) d\vec{r} dt \\
&= - \int_{-\infty}^{\infty} \int (i(H_0 + V_l) \Psi_f^{-*} \psi_i - i \Psi_f^{-*} H_0 \psi_0) d\vec{r} dt \\
&= -i \int_{-\infty}^{\infty} \int (\Psi_f^-)^* \vec{r} \cdot \vec{E}(t) \psi_i d\vec{r} dt \\
&= -i \int_0^{\tau} \int (\Psi_f^-)^* \vec{r} \cdot \vec{E}(t) \psi_i d\vec{r} dt
\end{aligned} \tag{47}$$

Kender man først T_{fi} , kender man også ionisationssandsynligheden, fotoelektronens angulære fordeling, samt energifordelingen. Der gælder nemlig følgende sammenhæng.

$$\frac{\partial^2 P_{fi}}{\partial E_p \partial \Omega_p} = p |T_{fi}|^2 \tag{48}$$

Her er P_{fi} ionisationssandsynligheden, E_p er slutenergien, og Ω_p er retningen hørende til impulsen \vec{p} for fotoelektronen. Vi skal bruge relationen (48) gentagne gange, så lad os derfor give et kort argument for (48).

Sandsynligheden for at fotoelektronen kommer ud i kontinuumet med impulsen \vec{p} er $|T_{fi}|^2$, idet ψ_f netop er karakteriseret ved impulsen \vec{p} . Dvs.

$$\frac{dP_{fi}}{p^2 dp d\Omega_p} = |T_{fi}|^2 \tag{49}$$

Da $E_p = \frac{p^2}{2}$ og dermed $dE = p dp$, giver ovenstående netop den ønskede relation (48).

4.2 Volkov approksimationen til Ψ_f^-

I princippet er vi nu klar til at beregne T_{fi} og dermed $\frac{\partial^2 P}{\partial E_p \partial \Omega_p}$. Vi har dog et stort problem, vi kender ikke Ψ_f^- . Faktisk er det ikke muligt at løse (34) analytisk. En mulig måde at løse dette problem på er at approksimere Ψ_f^- med en kendt funktion. Hvis feltet er meget stærkt, kan vi se bort fra vekselvirkningen mellem protonen og fotoelektronen. I så fald kan vi erstatte Ψ_f^- med en Volkov-bølgefunktion,

$$\Psi_f^-(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp(i(\vec{p} + \vec{A}(t)) \cdot \vec{r} - \frac{i}{2} \int_0^t (\vec{p} + \vec{A}(t'))^2 dt') \tag{50}$$

som netop er bølgefunktionen for en elektron i et elektromagnetisk felt. Overgangsamplitude T_{fi} i denne aproksimation kalder vi for T_{fi}^V . Vi ønsker nu at finde et udtryk for

T_{fi}^V . Med ovenstående approximation har vi, at

$$T_{fi}^V = -\frac{i}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_0^\tau \exp\left(\frac{i}{2} \int_0^t (\vec{p} + \vec{A}(t))^2 dt - i\epsilon_i t\right) \times \vec{E}(t) \cdot \int \varphi_i(\vec{r}) \vec{r} \exp\left(-i(\vec{p} + \vec{A}(t)) \cdot \vec{r}\right) d\vec{r} dt \quad (51)$$

Definer nu operatoren ∇_p ved,

$$\nabla_p = \left(\frac{\partial}{\partial p_x}, \frac{\partial}{\partial p_y}, \frac{\partial}{\partial p_z} \right) \quad (52)$$

Det ses nu meget nemt, at vi har følgende identitet,

$$\vec{r} \exp\left(-i(\vec{p} + \vec{A}(t)) \cdot \vec{r}\right) = i \nabla_p \exp\left(-i(\vec{p} + \vec{A}(t)) \cdot \vec{r}\right) \quad (53)$$

som indsættes i udtrykket for T_{fi}^V . Dette giver,

$$\begin{aligned} T_{fi}^V &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_0^\tau \exp\left(\frac{i}{2} \int_0^t (\vec{p} + \vec{A}(t))^2 dt - i\epsilon_i t\right) \\ &\quad \times \vec{E} \cdot \int \varphi_i(\vec{r}) \nabla_p \exp\left(-i(\vec{p} + \vec{A}(t)) \cdot \vec{r}\right) d\vec{r} dt \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_0^\tau \exp\left(\frac{i}{2} \int_0^t (\vec{p} + \vec{A}(t))^2 dt - i\epsilon_i t\right) \\ &\quad \times \vec{E} \cdot \nabla_p \int \varphi_i(\vec{r}) \exp\left(-i(\vec{p} + \vec{A}(t)) \cdot \vec{r}\right) d\vec{r} dt \\ &= \int_0^\tau \vec{E} \cdot \nabla_p \left(\Phi_i(\vec{p} + \vec{A}(t)) \right) \exp\left(\frac{i}{2} \int_0^t (\vec{p} + \vec{A}(t))^2 dt - i\epsilon_i t\right) dt \quad (54) \end{aligned}$$

hvor

$$\Phi_i(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \varphi_i(\vec{r}) \exp(-\vec{p} \cdot \vec{r}) d\vec{r} \quad (55)$$

er Fouriertransformationen af den initielle bølgefunktion. Altså grundtilstanden for brint i implusrummet. Det kan vises, at[3]

$$\Phi_i(\vec{p}) = \frac{2^{\frac{3}{2}}}{\pi} \frac{1}{(p^2 + 1)^2} \quad (56)$$

Heraf følger umiddelbart,

$$\begin{aligned} T_{fi}^V &= -\frac{2^{\frac{5}{2}}}{\pi} \int_0^\tau \vec{E} \cdot (\vec{p} + \vec{A}(t)) \frac{1}{((\vec{p} + \vec{A}(t))^2 + 1)^3} \\ &\quad \times \exp\left(\frac{i}{2} \int_0^t (\vec{p} + \vec{A}(t))^2 dt - i\epsilon_i t\right) dt \quad (57) \end{aligned}$$

Dette er vores færdige resultat, som udtrykker T_{fi}^V ved kendte størrelser, nemlig E-feltet og A-feltet.

4.3 Coulomb-Volkov approksimationen til Ψ_f^-

I dette kapitel vil vi forsøge, at forbedre Volkov-approksimationen til Ψ_f^- . Problemet ved Volkov-approksimationen er, at den fuldstændigt ser bort fra Coulomb potentialet. Vi kunne godt tænke os en approksimation til Ψ_f^- , som til en vis grad tager højde for Coulomb potentialet. Funktionen Ψ_f^- er som nævnt tidligere en løsning til,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\nabla^2}{2} - \frac{Z}{r} + \vec{r} \cdot \vec{E} \right) \Psi(\vec{r}, t) \quad (58)$$

med $Z = 1$. Vores strategi er nu, at konstruere en funktion som i grænserne $Z = 0$, og $\vec{E} \equiv \vec{0}$ giver Ψ_f^- . For $Z = 0$, svarende til at vi ser helt bort fra Coulomb-potentialet, skal Ψ_f^- gå over i bølgefunktionen for en elektron i et elektromagnetisk felt. Altså skal Ψ_f^- være en Volkov bølge når $Z = 0$. For $\vec{E} \equiv \vec{0}$ skal Ψ_f^- gå over i en indgående kontinuums bølgefunktion for et brint lignende system. Det betyder, rent matematisk, at Ψ_f^- skal gå over i en løsning til,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\nabla^2}{2} - \frac{Z}{r} \right) \Psi(\vec{r}, t) \quad (59)$$

med positiv energi. Denne ligning har løsningen[3],

$$\psi_f^Z(\vec{r}, t) = \varphi_f^Z(\vec{r}) \exp(-i\epsilon_f t) \quad (60)$$

hvor

$$\varphi_f^Z(\vec{r}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{\pi\nu Z}{2}\right) \Gamma(1 + i\nu Z) \exp(i\vec{p} \cdot \vec{r}) F(-i\nu Z; 1; -ipr - i\vec{p} \cdot \vec{r}) \quad (61)$$

Her er \vec{p} fotoelektronens impuls, $\epsilon_f = \frac{v^2}{2}$ er fotoelektronens slutenergi, og $\nu Z = \frac{Z}{p}$. Betragt nu funktionen [8],

$$\Psi_f^{CV}(\vec{r}, t; Z) = \psi_f^Z(\vec{r}, t) L(\vec{r}, t) \quad (62)$$

hvor

$$L(\vec{r}, t) = \exp\left(i\vec{A} \cdot \vec{r} - i\vec{p} \cdot \int_0^t \vec{A}(t') dt' - \frac{i}{2} \int_0^t A^2(t') dt'\right) \quad (63)$$

er den tidsafhængige del af Volkov bølgefunktionen. Funktionen Ψ_f^{CV} kaldes for en Coulomb-Volkov bølgefunktion. Det ses meget nemt, at den opfører sig ligesom Ψ_f^- i grænsen $Z = 0$, og grænsen $\vec{E} \equiv \vec{0}$. Som nævnt tidligere foretager vi nu approksimationen,

$$\Psi_f^-(\vec{r}, t) = \Psi_f^{CV}(\vec{r}, t; Z = 1) \quad (64)$$

Overgangsamplituden T_{fi} i denne approksimation kalder vi for $T_{fi}^{CV2^-}$. I resten af kapitlet vil vi udlede et udtryk for $T_{fi}^{CV2^-}$. Vi har, at

$$\begin{aligned} T_{fi}^{CV2^-} &= -i \int_0^\tau \exp\left(i\left(\frac{p^2}{2} - \epsilon_i\right)t + i\vec{p} \cdot \int_0^t \vec{A}(t') dt' + \frac{i}{2} \int_0^t A^2(t') dt'\right) \\ &\quad \times \int \varphi_f^*(\vec{r}) \exp\left(-i\vec{A}(t) \cdot \vec{r}\right) \vec{r} \cdot \vec{E}(t) \varphi_i(\vec{r}) d\vec{r} dt \end{aligned} \quad (65)$$

Vi definere nu, ligesom i [8], funktionerne h , f og g ved,

$$h(t) = i \left(\frac{p^2}{2} - \epsilon_i \right) + i\vec{p} \cdot \vec{A}(t) + \frac{i}{2} A^2(t) \quad (66)$$

$$f(t) = \exp \left(\int_0^t h(t') dt' \right) \quad (67)$$

$$g(t) = \int \varphi_f^*(\vec{r}) \exp \left(-i\vec{A}(t) \cdot \vec{r} \right) \varphi_i(\vec{r}) d\vec{r} \quad (68)$$

Funktionen h beskriver fotoelektronens energi, mens f er lig den tidsafhængige del af Volkov bølgen gange den tidsafhængige del af $\psi_f^{Z=1}$. Funktionen f beregnes analytisk ved hjælp af Maple. Det ses, at

$$T_{fi}^{CV2^-} = - \int_0^\tau f(t) \frac{\partial}{\partial t} g(t) dt \quad (69)$$

idet vi benytter at $\frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(t) = -\vec{E}(t)$. Partiel integration fortæller straks, at ovenstående kan omskrives til følgende resultat.

$$T_{fi}^{CV2^-} = [f(t)g(t)]_0^\tau + \int_0^\tau h(t)f(t)g(t)dt \quad (70)$$

En fysisk realistisk puls er nødt til at opfylde, betingelsen $\vec{A}(\tau) - \vec{A}(0) = \int_0^\tau \vec{E} dt = \vec{0}$. Pulser som ikke opfylder denne relation, giver anledning til dc komponenter i det tomme rum. Dette er højst ufysisk. I [4] er dette vigtige faktum diskuteret nærmere. I det følgende antages det at pulsens vektorpotential opfylder $\vec{A}(\tau) = \vec{A}(0) = 0$, hvilket altid kan opnåes, hvis vektorpotentialet opfylder ovenstående betingelse. Da bølgefunktionerne φ_f og φ_i er ortogonale, betyder det at,

$$[f(t)g(t)]_0^\tau = 0 \quad (71)$$

Hermed har vi vist følgende vigtige relation.

$$T_{fi}^{CV2^-} = \int_0^\tau h(t)f(t)g(t)dt \quad (72)$$

I princippet kan ovenstående fint benyttes til numeriske beregninger, idet g så skulle beregnes numerisk. Det er dog ønskværdigt, at kende et analytisk udtryk for g , da det simplificere det numeriske arbejde. Det er muligt at beregne et udtryk for g ved hjælp af de såkaldte Nordsieck integraler. Vi har følgende,

$$\begin{aligned} g(t) &= \int \varphi_f^*(\vec{r}) \exp \left(-i\vec{A}(t) \cdot \vec{r} \right) \varphi_i(\vec{r}) d\vec{r} \\ &= 2^{-\frac{3}{2}} \pi^{-2} \exp \left(\frac{\pi\nu}{2} \right) \Gamma^*(1 + i\nu) \\ &\quad \times \int \exp \left(-r - i \left(\vec{p} + \vec{A}(t) \right) \cdot \vec{r} \right) F(i\nu; 1; i\vec{p}r + i\vec{p} \cdot \vec{r}) d\vec{r} \end{aligned} \quad (73)$$

Rumintegraler af typen,

$$\ell^\pm(\nu, \beta, \vec{K}, \vec{P}) = \int \frac{1}{r} \exp(-\beta r + i\vec{P} \cdot \vec{r}) F(i\nu; 1; iKr \pm i\vec{K} \cdot \vec{r}) d\vec{r} \quad (74)$$

hvor ν, β , er reelle tal, og $\beta > 0$, kaldes for Nordsieck integraler. Ved brug af kompleks funktionsteori kan det vises, at [10]⁶

$$\ell^+(\nu, \beta, \vec{K}, \vec{P}) = \frac{4\pi}{\beta^2 + P^2} \left(\frac{(\vec{P} + \vec{K})^2 - (K + i\beta)^2}{\beta^2 + P^2} \right)^{-i\nu} \quad (75)$$

Vi får brug for dette resultat om lidt. I termer af Nordsieck integraler har funktionen g følgende form:

$$g(t) = -2^{-\frac{3}{2}} \pi^{-2} \exp\left(\frac{\pi\nu}{2}\right) \Gamma^*(1 + i\nu) \frac{\partial}{\partial \beta} \ell^+(i\nu, \beta, \vec{p}, -(\vec{p} + \vec{A}(t)))|_{\beta=1} \quad (76)$$

Efter en smule algebraiske omskrivninger fås ved brug af (75) følgende resultat, som giver et analytisk udtryk for g :

$$g(t) = -\sqrt{2} \pi^{-1} \exp\left(\frac{\pi\nu}{2}\right) \Gamma^*(1 + i\nu) \left(\frac{L}{T}\right)^{-i\nu} \left(\frac{2}{T^2} - \frac{i\nu}{L} \left(\frac{2(p+i)iT + 2L}{T^2}\right)\right) \quad (77)$$

Her er funktionerne L og T defineret ved,

$$T = 1 + (\vec{p} + \vec{A}(t))^2 \quad (78)$$

$$L = A^2(t) - (p+i)^2 \quad (79)$$

Hermed er vi færdige. Vi har nu et udtryk, som relaterer $T_{fi}^{CV2^-}$ til E og A-feltet.

5 Stærkfeltsionisation af H^- med en kort puls

5.1 Indledende kommentarer

Betragt en H^- ion som vekselvirker med en intens laserpuls med få cykle, hvor tidsaksen igen er valgt så $\vec{E}(t) = \vec{0}$ for $t \leq 0$ og $t \geq \tau$. Dette system er mere kompliceret end brint i et intens laserfelt med få cykler, fordi der jo nu er to elektroner, som kan vekselvirke med pulsen. Vi antager dog, at en single aktiv elektron model kan benyttes. Man kan vise, at H^- kun har en bunden tilstand [11] med bindingsenergien 0.75 eV. Bindingsenergien for brint i grundtilstanden er 13.6 eV. Dette betyder, at ovenstående antagelse er i orden, forudsat at feltstyrken ikke er alt for stor. Vi vil ikke gå nærmere ind på dette problem. Som før er vi interesseret i ionisationssandsynligheden pr vinkel pr energi. Vi antager, at H^- er i grundtilstanden til start, og er altså interesseret i sandsynligheden for at, pulsen løsriver den ydre elektron. Lad i betegne grundtilstanden, og lad f betegne

⁶Alle komplekse potenser indgår med deres principale værdi.

slutttilstanden. Et argument, helt tilsvarende det i sektion 4.1, giver følgende identitet for overgangsamplituden T_{fi} .

$$T_{fi} = -i \int_0^\tau \int (\Psi_f)^* \vec{r} \cdot \vec{E}(t) \Psi_i d\vec{r} dt \quad (80)$$

Overgangsamplituden er, som argumenteret for tidligere, relateret til ionisations sandsynligheden.

$$\frac{\partial P_{fi}}{\partial E_p \partial \Omega_p} = p |T_{fi}|^2 \quad (81)$$

5.2 Grundtilstanden

For at være i stand til at beregne overgangsamplituden skal vi kende grundtilstanden for H^- samt slutttilstanden Ψ_f .

Lad os først se på slutttilstanden. Den inderste elektron skærmer for protonen, så fotoelektronen føler effektivt ingen Coulomb påvirkning. Men dette betyder jo netop, at Ψ_f effektivt er bølgefunktionen for en elektron i et elektromagnetisk felt og dermed en Volkov-bølgefunktion.

$$\Psi_f(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \exp(i(\vec{p} + \vec{A}(t)) \cdot \vec{r} - \frac{i}{2} \int_0^t (\vec{p} + \vec{A}(t'))^2 dt') \quad (82)$$

Lad os nu se på grundtilstanden. Da der er tale om et stationært problem, ved vi allerede,

$$\Psi_i(\vec{r}, t) = \varphi_i(\vec{r}) \exp(-i\epsilon_i t) \quad (83)$$

hvor ϵ_i er grundtilstandsenergien, og φ_i er en løsning til den tidsuafhængige Schrödinger ligning.

$$\left(-\frac{\nabla^2}{2} + U(\vec{r}) \right) \varphi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \varphi_i(\vec{r}) \quad (84)$$

Her beskriver leddet U vekselvirkningen mellem brint atomet og elektronen. På grund af skærmning må der gælde $U \approx 0$ for store værdier af r . Dvs, at for store r skal φ_i opfylde differentialligningen.

$$-\frac{\nabla^2}{2} \varphi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \varphi_i(\vec{r}) \quad (85)$$

Det eftervises let at en løsning er,

$$\psi = \frac{\sqrt{2|\epsilon_i|} f}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{r} \exp\left(-\sqrt{2|\epsilon_i|} r\right) \quad (86)$$

hvor $f^2 = 2.65$ er en konstant, hvis betydning er diskuteret i [12]. Dvs,

$$\varphi_i(\vec{r}) \approx \frac{\sqrt{2|\epsilon_i|} f}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{r} \exp\left(-\sqrt{2|\epsilon_i|} r\right) \quad (87)$$

for store værdier af r . Vi foretager nu approksimationen,

$$\varphi_i(\vec{r}) = \frac{\sqrt{2|\epsilon_i|}f}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{r} \exp\left(-\sqrt{2|\epsilon_i|}r\right) \quad (88)$$

og erstatter altså φ_i med dens asymptotiske form. Vi skal benytte φ_i til at beregne T_{fi} . Ved at foretage ovenstående approksimation gør vi en fejl for små r . Men denne fejl nedprioriteres i beregningen af T_{fi} , da udtrykket for T_{fi} indeholder faktoren $\vec{r} \cdot \vec{E}$. Her er det altså også vigtigt, at vi benytter længde gauge. Ovenstående argument holder ikke for hastigheds gauge, da denne prøber små r . Vi er nu klar til at beregne et brugervenligt udtryk for T_{fi} .

5.3 Overgangsamplituden

Målet med dette afsnit er at finde et udtryk som relaterer T_{fi} til E og A-feltet beskrivende pulsen. Et argument, helt tilsvarende det i section 4.2, giver følgende resultat,

$$T_{fi} = \int_0^\tau \exp\left(\frac{i}{2} \int_0^t (\vec{p} + \vec{A}(t'))^2 dt' - i\epsilon_i t\right) \vec{E}(t) \cdot \nabla_p \Phi_i(\vec{p} + \vec{A}(t)) dt \quad (89)$$

hvor Φ_i er Fouriertransformen af φ_i . Det kan relativt nemt vises, at[3]

$$\Phi_i(\vec{q}) = \frac{f\sqrt{2|\epsilon_i|}}{\pi} \frac{1}{2|\epsilon_i| + q^2} \quad (90)$$

Heraf følger nu, ved differentiation, følgende resultat.

$$T_{fi} = -\frac{2f\sqrt{2|\epsilon_i|}}{\pi} \int_0^\tau \frac{1}{(2|\epsilon_i| + (\vec{p} + \vec{A}(t))^2)^2} \exp\left(\frac{i}{2} \int_0^t (\vec{p} + \vec{A}(t'))^2 dt' - i\epsilon_i t\right) \times \vec{E}(t) \cdot (\vec{p} + \vec{A}(t)) dt \quad (91)$$

Dette er netop det ønskede resultat, som relaterer T_{fi} til størrelser, som beskriver pulsen. Vi har nu alt den grundlæggende teori på plads, og i næste kapitel vil vi se på de numeriske resultater.

6 Resultater

6.1 Indledende kommentarer

I dette afsnit præsenteres vores resultater. Disse er baseret på numeriske beregninger udført ved hjælp af programmet Matlab. Lad os kort diskutere de numeriske metoder, vi har brugt.

Tidsintegralet i T_{fi} er beregnet ved hjælp af Gauss-Legendre kvadratur, mens alle andre integraler er beregnet via simple højresummer/venstresummer. Gauss-Legendre kvadratur er en yderst effektiv integrationsalgoritme, og lad os derfor se lidt nærmere

på den.

Lad $f : [a; b] \rightarrow \mathbb{R}$ være en integrabel funktion. Det er så velkendt, at

$$\int_a^b f(t)dt \approx \sum_{i=1}^n f(t_i)\Delta t \quad (92)$$

for store værdier af n . Her er $a \leq t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_n = b$ en ækvidistant inddeling af integrationsaksen. Ideen i Gauss-Legendre kvadratur er, at bruge en inddeling som i højere grad tager hensyn til funktionen f . Der hvor f varierer mest skal vi bruge en fin inddeling, mens vi kan benytte en grovere inddeling, de områder hvor f ikke varierer ret meget. Gauss-Legendre algoritmen giver en inddeling $a \leq t_1 \leq \dots \leq t_n = b$, samt et sæt af vægte $\{w_1, w_2, \dots, w_n\}$ således at,

$$\int_a^b f(t)dt = \sum_{i=1}^n f(t_i)w_i \quad (93)$$

hvis f er et polynomium af grad $2n + 1$. Da enhver kontinuert funktion på et lukket begrænset interval kan approksimeres vilkårligt godt med et polynomium, har vi altså følgende resultat.

$$\int_a^b f(t)dt \approx \sum_{i=1}^n f(t_i)w_i \quad (94)$$

Gauss-Legendre algoritmen er beskrevet i langt større detalje i [13]. Det skal bemærkes, at beregning af T_{fi} typisk kræver ganske store værdier af n , og er derfor typisk tidskrævende.

6.2 Hydrogen i et lineært polariseret laserfelt

6.2.1 E-feltet

Vi ser på et hydrogen atom, som vekselvirker med en intens laserpuls med få cykler. Laserpulsens er, lige som i [2], beskrevet ved vektorpotentialen,

$$\vec{A}(t) = \begin{cases} -\frac{\epsilon_0(t)}{\omega} \sin(\omega(t - \frac{\tau}{2}) + \phi) \hat{z} & \text{for } t \in [0; \tau] \\ \vec{0} & \text{ellers} \end{cases}$$

hvor ω er vinkelfrekvensen, τ er pulslængden, ϕ er CEPD, og ϵ_0 er indhyldningskurven. Indhyldningskurven er givet ved,

$$\epsilon_0(t) = E_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) \quad (95)$$

hvor E_0 er den maksimale feltstyrke.

Vi minder lige om at $\tau = \frac{2\pi N}{\omega}$, hvor N er antallet af cykler. Bemærk så at ovenstående vektorpotential opfylder betingelsen $\vec{A}(\tau) = \vec{A}(0) = \vec{0}$, som jo netop skal være opfyldt

for en fysisk puls.

Når man kender vektorpotentialen, er det let at beregne det elektriske felt. Man benytter bare relationen $-\frac{\partial}{\partial t}\vec{A}(t) = \vec{E}(t)$. Vores vektorpotential giver følgende E-felt.

$$\vec{E}(t) = \begin{cases} \epsilon_0(t) \cos(\omega(t - \frac{\tau}{2}) + \phi) \hat{z} \\ + \frac{2\pi E_0}{\omega\tau} \sin(\omega(t - \frac{\tau}{2}) + \phi) \sin(\frac{\pi t}{\tau}) \cos(\frac{\pi t}{\tau}) \hat{z} & \text{for } t \in [0; \tau] \\ \vec{0} & \text{ellers} \end{cases}$$

Den sidste del af E-feltet, $\frac{2\pi E_0}{\omega\tau} \sin(\omega(t - \frac{\tau}{2}) + \phi) \sin(\frac{\pi t}{\tau}) \cos(\frac{\pi t}{\tau}) \hat{z}$, skyldes netop størrelsen $\frac{\partial}{\partial t}\epsilon_0$. For en lang puls vil $\frac{\partial}{\partial t}\epsilon_0 \approx 0$, men for en kort puls er denne faktor vigtig.

6.2.2 ATI-spektre

Ved et ATI-spektrum⁷ forstås en $(E_p, \frac{\partial P}{\partial E_p})$ graf, hvor E_p er fotoelektronens slutenergi. Et ATI-spektrum viser altså, med andre ord, fotoelektronens energifordeling som funktion af fotoelektronens energi. ATI-spektrene har tre forskellige formål i dette projekt. Dels benytter vi dem til at sammenligne Volkov approksimationen med Coulomb-Volkov approksimationen. Derudover bruges de til at checke vores Matlab-kode. Sidst, men ikke mindst, giver de oplysninger om, hvornår $\frac{\partial P_{fi}}{\partial E_p}$ er lille.

ATI-spektrene beregnes v.h.a. følgende resultater, som vi tidligere har udledt,

$$\frac{\partial P_{fi}^V}{\partial E_p} = 2\pi \int_0^\pi p |T_{fi}^V|^2 \sin(\theta) d\theta \quad (96)$$

$$\frac{\partial P_{fi}^{CV2-}}{\partial E_p} = 2\pi \int_0^\pi p |T_{fi}^{CV2-}|^2 \sin(\theta) d\theta \quad (97)$$

hvor vi her udnytter, at hverken T_{fi}^{CV2-} eller T_{fi}^V afhænger, af azimuthalvinklen φ med vores valg af E-felt. Figur 2 viser netop et eksempel på et ATI-spektrum.

Vi ser, at de to approksimationer giver et ATI-spektrum med helt samme struktur. Den eneste forskel er, at $\frac{\partial P_{fi}}{\partial E_p}$ er cirka en størrelsesorden større i Volkov-approksimationen. I Volkov-approksimationen ser vi bort fra vekselvirkningen mellem den positive kerne og den negative fotoelektron, og derfor må vi netop forvente, at $\frac{\partial P_{fi}}{\partial E_p}$ er størst i Volkov-approksimationen.

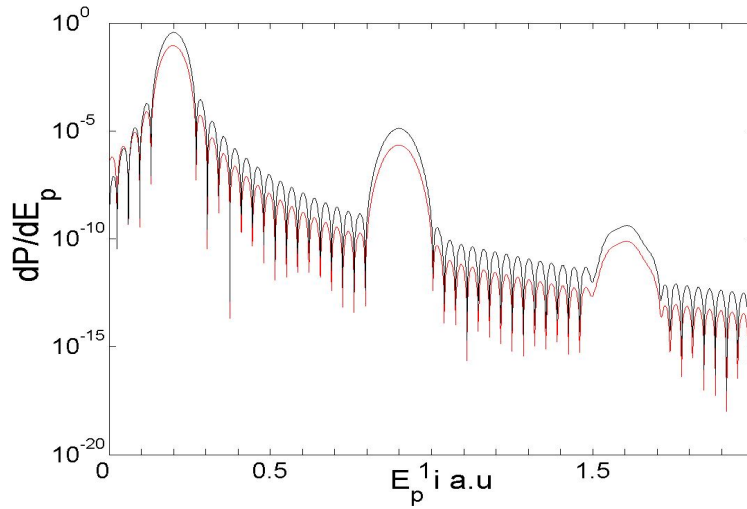
Toppene skyldes, at ionisations sandsynligheden er størst, når photoelektronens energi opfylder energibevarelse. Altså når⁸,

$$E_p = \epsilon_i + p\omega \quad (98)$$

hvor p er antallet af absorberede fotoner. Da en 1-foton absorption er meget mere sandsynlig end for eksempel en 3-foton absorption, vil vi forvente, at toppene aftager i højde. Figur 2 viser, at det netop er tilfældet. Toppenes bredde skyldes Heisenbergs

⁷ATI står for Above threshold ionization

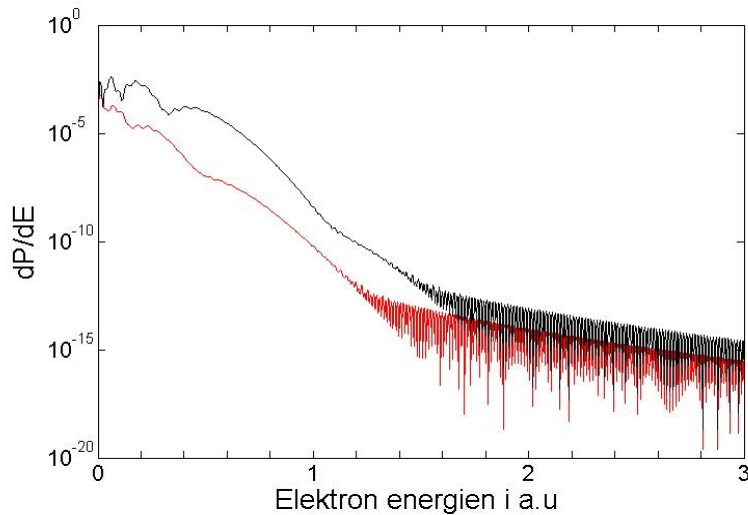
⁸Med vores valg af parametre er U_p forsvindende



Figur 2: ATI-spektre for en puls med $E_0 = 0,01$, $\omega = 0,7$, $\phi = 0$ og $\tau = 179,52$. Den røde kurve viser $CV2^-$ beregningen, mens den sorte kurve viser Volkov-beregningen.

energi-tid usikkerhedsrelation, $\Delta E \Delta t \geq \frac{1}{2}$, som jo netop viser, at energibevarelsen kan brydes når bare Δt , processens tidslige længde, er lille nok. Bemærk, at formuleringen i kapitel 3 eksplicit indeholder energibevarelsen. Figur 2 er i fin overensstemmelse med referencen [14].

Et andet af vores beregnede ATI-spektrede er vist i figur 3. Ligesom som tidligere ser vi,



Figur 3: ATI-spektre for en puls med $E_0 = 0,047$, $\omega = 0,055$, $\phi = 0$ og $\tau = 456,96$ ($\lambda = 800\text{nm}$, $I = 8,0 \cdot 10^{13}\text{W/cm}^2$). Den røde kurve viser $CV2^-$ beregningen, mens den sorte kurve viser Volkov-beregningen.

at $\frac{\partial P_{fi}}{\partial E_p}$ er større i Volkov-approximationen. De to approksimationer giver ikke helt den samme struktur denne gang. Dette indikere, at vi ikke helt kan se bort fra Coulomb-

potentialet.

6.2.3 CEPD-effekter

Lad P_+ betegne sandsynligheden for at fotoelektronen rammer en cirkulær detektor beskrevet ved $0 < \theta < \theta_0$, hvor θ_0 er en konstant beskrivende detektorens radius. Lad P_- være sandsynligheden for at fotoelektronen rammer en cirkulær detektor beskrevet ved $\pi - \theta_0 < \theta < \pi$. Vi forventer at $P_+ = P_-$ for en lang puls. For en puls med få cykler vil vi forvente, at P_+ og P_- afhænger kraftigt af CEPD. I dette afsnit vil vi netop undersøge P_+ og P_- afhængighed af CEPD.

Vi benytter Coulomb-Volkov approksimationen. Fra tidligere har vi følgende formler til beregning af P_+ og P_- :

$$P_+ = \int \int_{0 < \theta < \theta_0} \frac{\partial^2 P_{fi}}{\partial E_p \partial \Omega_p} d\Omega_p dE_p = 2\pi \int_0^\infty \int_0^{\theta_0} p^2 |T_{fi}^{CV2-}|^2 \sin(\theta) d\theta dp \quad (99)$$

$$P_- = \int \int_{\pi - \theta_0 < \theta < \pi} \frac{\partial^2 P_{fi}}{\partial E_p \partial \Omega_p} d\Omega_p dE_p = 2\pi \int_0^\infty \int_{\pi - \theta_0}^\pi p^2 |T_{fi}^{CV2-}|^2 \sin(\theta) d\theta dp \quad (100)$$

Her er det vigtigt, at vide hvor store impulse man behøver tage med i den numeriske integration. Med andre ord hvornår $\frac{\partial P_{fi}}{\partial E_p}$ er 'lille'. I [2] beregnede de P_+ og P_- på basis af Schrödinger ligningen. Deres resultater er vist i figur 4.

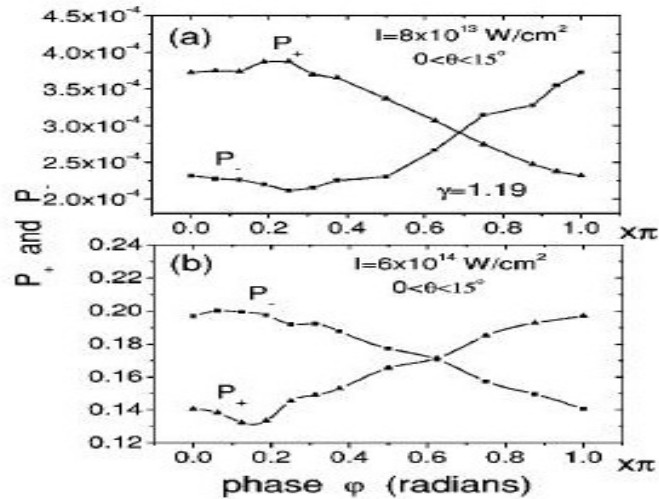
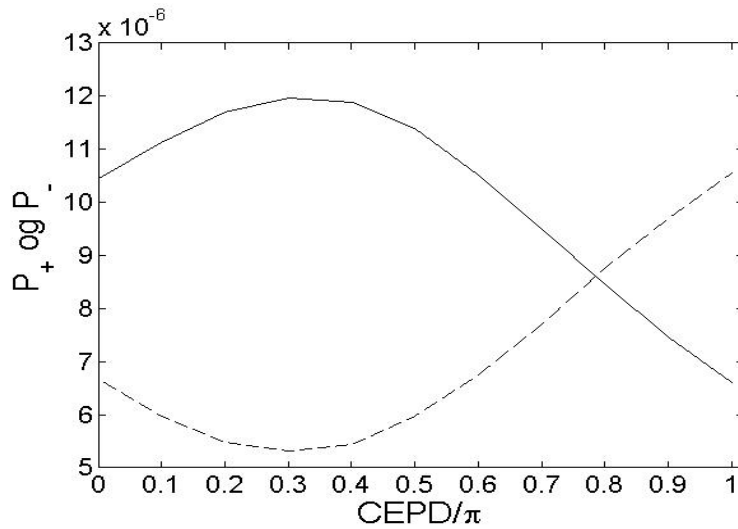


FIG. 3. Forward P_+ (Δ) and backward (\square) P_- probabilities as functions of the absolute phase ϕ for laser intensity (a) $I = 8 \times 10^{13}$ W/cm² and (b) $I = 6 \times 10^{14}$ W/cm².

Figur 4: Figur 3 i [2]

Figur 5 viser vores resultater for parametre svarende til figur 3(a) i referencen [2].

Figur 5 er i god kvalitativ overensstemmelse med figur 3(a) i [2], og er dette bachelorprojektets hovedresultat. Figur 3(a) i [2] er beregnet på basis af en numerisk løsning



Figur 5: Sandsynlighederne P_+ (den fuldt optrukne kurve) og P_- (den stibledede kurve) som funktion af CEPD for en puls med $E_0 = 0,047$, $\omega = 0,055$, $\theta_0 = 15^\circ$ og $\tau = 456,96$ ($\lambda = 800\text{nm}$, $I = 8.0 \cdot 10^{13}\text{W/cm}^2$)

af Schrödinger ligningen, og må derfor betragtes som rigtig. Figur 5 viser derfor, at Coulomb-Volkov approksimationen kvalitativt kan gøre rede for CEPD-effekter.

Vi ser, at P_+ har maksimum for $\phi \approx 0,3\pi$, mens P_- har minimum for denne værdi af CEPD. Endvidere ses det at P_+ er større end P_- indtil $\phi \approx 0,8\pi$, derefter er det omvendt. Alt dette er i udemærket overensstemmelse med figur 3(a) i [2].

Forholdet $\frac{P_+}{P_-}$ er et mål for asymmetrien i den angulære fordeling af fotoelektroner, og dermed et mål for CEPD effekterne. Vi ser, at det er muligt at opnå $\frac{P_+}{P_-} \approx 2$. Det er altså muligt, at opnå en betydelig asymmetri vha. CEPD.

For $\phi = \frac{\pi}{2}$ kan asymmetrien forklares ved hjælp af følgende semiklassiske model[15]. Til tiden $t = t_0$ undslipper fotoelektronen Coulomb-barrieren, og derefter bevæger fotoelektronen sig som en klassisk partikel påvirket af kraften $\vec{F} = -\vec{E} - \nabla V$, med start hastigheden 0. Vi er naturligvis kun interesseret i fotoelektronens z-komponent, og får ifølge Newtons 2. lov,

$$\frac{d^2z}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial t}A_z(t) - \frac{\partial}{\partial z}V \quad (101)$$

Vi ser nu bort fra Coulomb potentialet V , og får derved følgende differentiaalligning for fotoelektronens z-komponent.

$$\frac{d^2z}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial t}A_z(t) \quad (102)$$

Denne differentiaalligning løses let ved integration. Vi får,

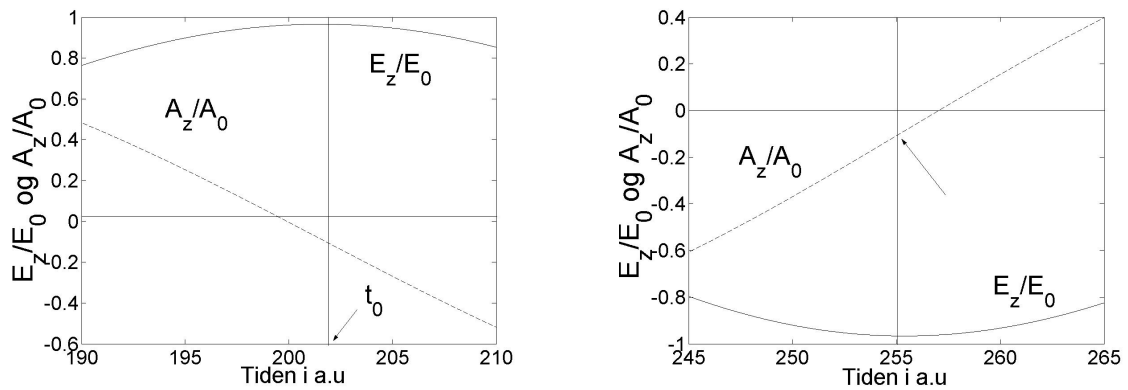
$$v_z(t) = A_z(t) + v_d \quad (103)$$

$$z(t) = z(t_0) + \int_{t_0}^t A_z(t')dt' + v_d(t - t_0) \quad (104)$$

hvor $v_d = -A_z(t_0)$ idet vi husker at $v(t_0) = 0$. Ovenstående løsning fortæller os, at forholdet $\frac{P_+}{P_-}$ er bestemt af fortegnet på v_d . Hvis $v_d > 0$ vil $v_z(t) > 0$ for $t > \tau$. Vi vil så forvente at $P_+ > P_-$. Hvis $v_d < 0$ er det naturligt omvendt.

Ionisations sandsynligheden har globalt maksimum, når størrelsen af E-feltet har globalt maksimum. Et oplagt bud på t_0 er et af de tidspunkter, hvor $|\vec{E}|$ er maksimal. Som t_0 vælger vi altså et af de tidspunkter, hvor $|\vec{E}|$ har globalt maksimum.

For $\phi = \frac{\pi}{2}$ har $|\vec{E}| = |E_z|$ globalt maksimum til 2 tider. Figur 6 viser $\frac{E_z}{E_0}$ og $\frac{A_z}{A_0}$ som funktion af tiden i nærheden af de to tider. Det ses at $v_d > 0$ i begge tilfælde. Derfor må $P_+ > P_-$ for $\phi = \frac{\pi}{2}$ ifølge modellen. For $\phi = 0$ har størrelsen af E-feltet maksimum



Figur 6: $\frac{E_z}{E_0}$ og $\frac{A_z}{A_0}$ som funktion af tiden i nærheden af de to kandidater til t_0

globalt maksimum for $t = \frac{\tau}{2}$. Det ses direkte, $v_d = -A_z(t_0) = 0$, samt at v_d skifter fortegn i t_0 . Heraf følger nu $P_+ = P_-$ for $\phi = 0$ ifølge modellen. Dette er tydeligvis ikke i overensstemmelse med vores kvantemekaniske beregning. Problemet er, at vi i ovenstående model ser helt bort fra Coulomb-vekselvirkningen.

6.3 Hydrogen i et cirkulært polariseret laserfelt

6.3.1 E-feltet

Vi ser på et hydrogen atom, som vekselvirker med en intens cirkulært polariseret laserpuls. I [16] beskrives pulsen ved følgende E-felt:

$$\vec{E}_1(t) = \begin{cases} \frac{E_0}{\sqrt{2}} \sin^2\left(\frac{\omega t}{2N}\right) (\cos(\omega t + \phi)\hat{e}_x + \sin(\omega t + \phi)\hat{e}_y) & \text{for } t \in [0; \tau] \\ 0 & \text{ellers} \end{cases}$$

Bemærk at dette felt ikke opfylder betingelsen $\int_0^\tau \vec{E}(t)dt = 0$, og er derfor ufysisk. I artiklen [16] skriver de dog, at de benytter et E-felt, som opfylder ovenstående betingelse. Muligvis har de valgt et rigtigt A-felt, og derefter beregnet E-feltet uden at differentiere indhyldningskurven. Betragt nu følgende vektorpotential,

$$\vec{A}_2(t) = \begin{cases} \frac{A_0}{\sqrt{2}} \sin^2\left(\frac{\omega t}{2N}\right) (\cos(\omega t + \phi')\hat{e}_x + \sin(\omega t + \phi')\hat{e}_y) & \text{for } t \in [0; \tau] \\ 0 & \text{ellers} \end{cases}$$

hvor $\phi' = \phi + \frac{\pi}{2}$. Dette vektorpotential fører til et E-felt i stil med E-feltet i [16]. Endvidere ses det umiddelbart, at E-feltet hørende til dette vektorpotential opfylder betingelsen $\vec{A}(\tau) = \vec{A}(0) = \int_0^\tau \vec{E}(t)dt = 0$. Vi bør altså benytte dette E-felt frem for E-feltet i [16]. Vi gennemfører dog beregningerne med begge E-felter, og sammenligner resultaterne.

6.3.2 Resultater med \vec{E}_1

Lad os forestille os at vi har to kvadratiske detektorer placeret i den positive hhv. negative x-retning. Detektoren i den positive x-retning er beskrevet ved vinklerne $\varphi \in [-0,01; 0,01]$ og $\theta \in [1,561; 1,581]$, mens den anden detektor er beskrevet ved $\varphi \in [\pi - 0,01; \pi + 0,01]$ og $\theta \in [1,561; 1,581]$. Ligesom i [16] er vi interesseret i sandsynlighederne P_\pm og sandsynlighederne pr energi $\frac{\partial P_\pm}{\partial E_p}$ for, at fotoelektroner detekteres af detektoren i den positive(+) x-retning hhv. negative(-) x-retning. Lad os først se på $\frac{\partial P_\pm}{\partial E_p}$. Vi har, at

$$\frac{\partial P_+}{\partial E_p} = \int_{-0,01}^{0,01} \int_{1,561}^{1,581} p |T_{fi}|^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi \quad (105)$$

og tilsvarende for $\frac{\partial P_-}{\partial E_p}$. Vi benytter, ligesom i [16], Volkov-approximationen til beregning af ovenstående. Figur 7 viser deres resultater, mens figur 8 viser vores.

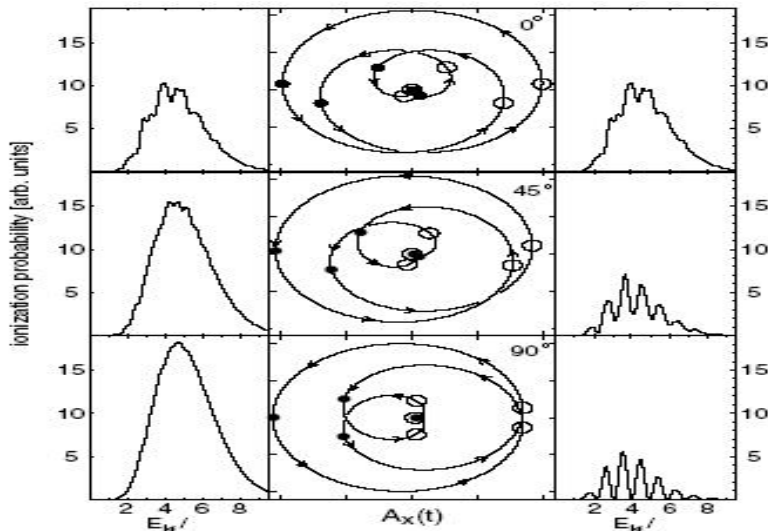
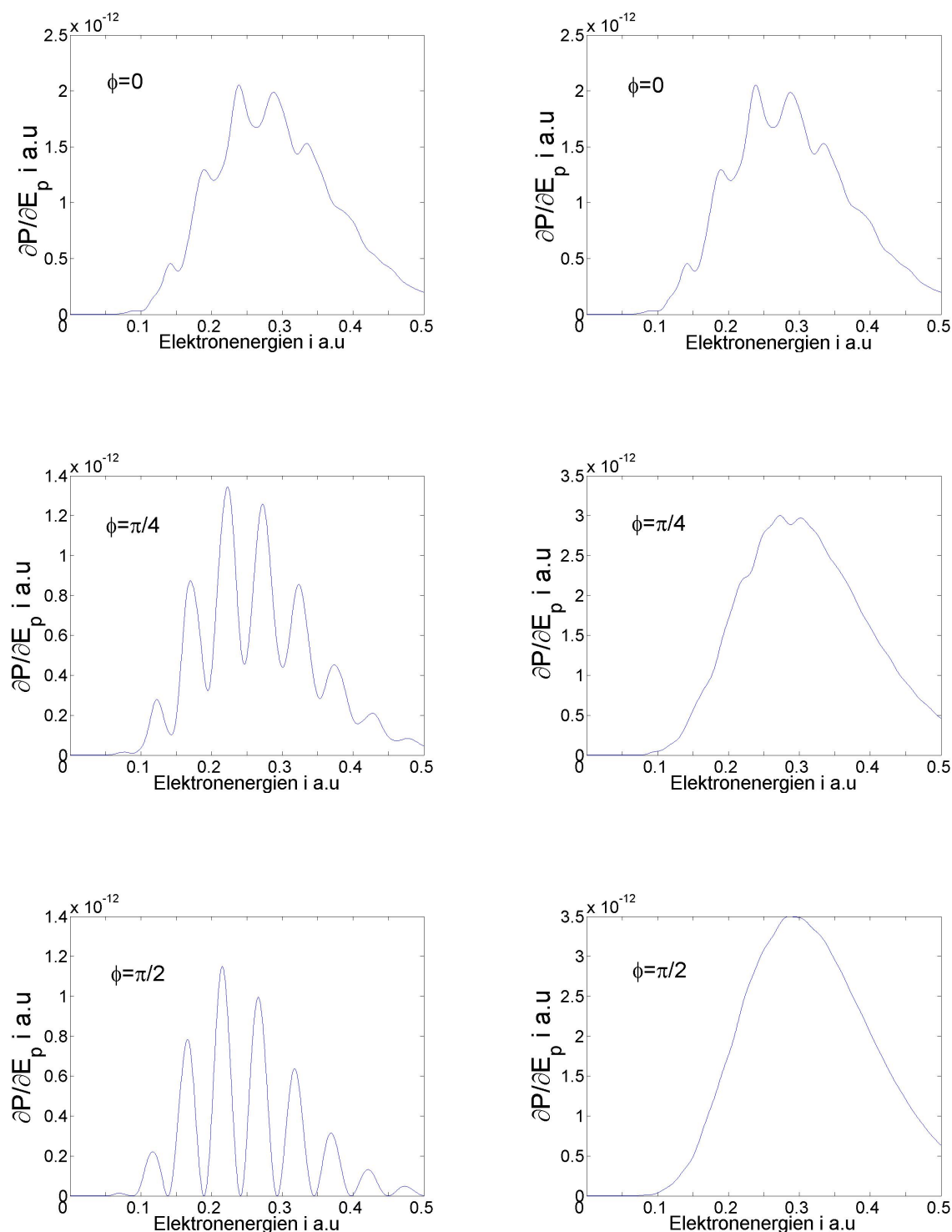


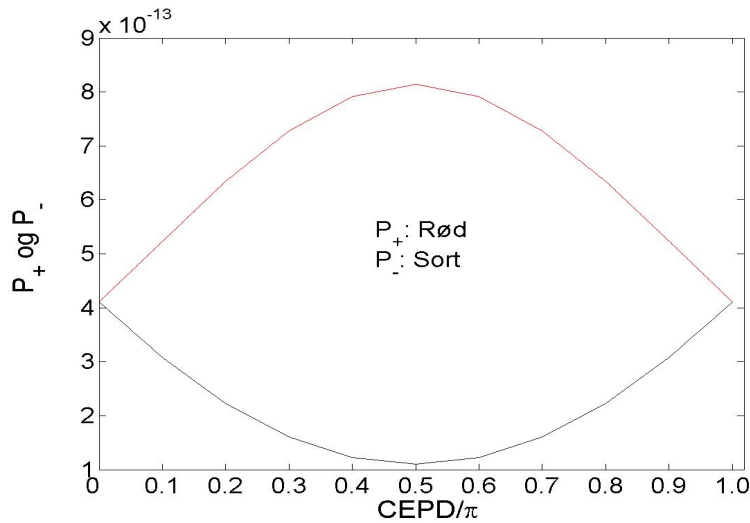
FIG. 1. Middle column: Parametric plots of the vector potential of the circularly polarized field (6) for $n_p = 4$ and the CEPDs $\phi = 0^\circ, 45^\circ$, and 90° from top to bottom. The arrows indicate the evolution in time. The saddle-point solutions of Eq. (5) for emission in the negative (positive) x direction are marked by solid (open) symbols. Left and right columns: Electron spectra recorded at the left and right detectors, respectively. The parameters $I_p = 14$ eV, $\lambda = 800$ nm, and $I = 5 \times 10^{13}$ W/cm² correspond to the experiment [12].

Figur 7: Figur 1 i [16]



Figur 8: $\frac{\partial P}{\partial E_p}$ som funktion af E_p for forskellige værdier af CEPD. Venstre kolonne af grafer viser $\frac{\partial P_-}{\partial E_p}$, mens højre kolonne angiver $\frac{\partial P_+}{\partial E_p}$. Parametrene er $E_0 = 0,04$, $\omega = 0,055$, og $\tau = 456,96$ ($\lambda = 800\text{nm}$, $I = 5,0 \cdot 10^{13}\text{W/cm}^2$).

Vores resultater er i perfekt overensstemmelse med [16] på nær et fortegn, idet deres resultater for $\frac{\partial P_+}{\partial E_p}$ svarer fuldstændigt til vores resultater for $\frac{\partial P_-}{\partial E_p}$ og omvendt. Muligvis regner de med en elektron ladning på 1, mens vi regner med en elektron ladning på -1. Det ville ihvertfald forklare uoverensstemmelsen. For $\phi = 0$ er de to grafer helt identiske, hvilket betyder at $P_+ = P_-$. Når $\phi = 0$ har vi altså symmetrisk elektron emission i den positive hhv. negative x-retning. For $\phi = \frac{\pi}{4}$ er dette billede ændret. Vi har nu klart en asymmetri, idet det tydeligt ses at $P_+ > P_-$. I tilfældet $\phi = \frac{\pi}{2}$ er dette fænomen blevet yderligere forstærket. Figur 9 bekræfter vores observationer.



Figur 9: Sandsynlighederne P_+ (den røde kurve) og P_- (den sorte kurve) som funktion af CEPD for en puls med $E_0 = 0,04$, $\omega = 0,055$, og $\tau = 456,96$ ($\lambda = 800\text{nm}$, $I = 5,0 \cdot 10^{13}\text{W/cm}^2$)

Igen ser vi, at det er muligt at opnå en betydelig asymmetri i den angulære fordeling vha. CEPD. Det skal bemærkes, at en Coulomb-Volkov beregning giver de samme effekter. Tallene er forskellige, men figur 9 får samme udseende.

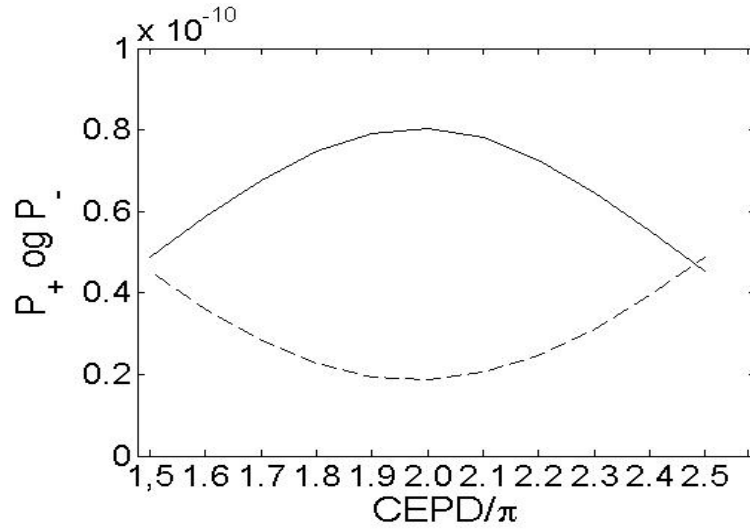
6.3.3 Resultater med \vec{A}_2

Lad os nu se på vores resultater, når vi benytter E-feltet hørende til vektorpotentialet,

$$\vec{A}(t) = \begin{cases} \frac{A_0}{\sqrt{2}} \sin^2\left(\frac{\omega t}{2N}\right) (\cos(\omega t + \phi')\hat{e}_x + \sin(\omega t + \phi')\hat{e}_y) & \text{for } t \in [0; \tau] \\ \vec{0} & \text{ellers} \end{cases}$$

Som tidligere er vi interesseret i P_{\pm} afhængighed af CEPD. Figur 10 viser vores resultater, når vi benytter Coulomb-Volkov approksimationen. Figur 10 viser helt de samme effekter som figur 8 og figur 9. For $\phi = \frac{\pi}{2}$ har vi størst asymmetri med $\frac{P_+}{P_-} \approx 4$, mens asymmetrien er, stort set, forsvundet for $\phi = 0$.

Sætter vi $t = t_0$ til at være de tidspunkter, hvor størrelsen af E-feltets x-komponent er maksimal, kan ovenstående forklares via 2 trins modellen.



Figur 10: Sandsynlighederne P_+ (den fuldt optrukne kurve) og P_- (den stiplede kurve) som funktion af CEPD for en puls med $A_0 = 0,73$, $\omega = 0,055$, og $\tau = 456,96$ ($\lambda = 800\text{nm}$, $I = 5,0 \cdot 10^{13}\text{W/cm}^2$)

6.4 H^- i et cirkulært polariseret laserfelt

Vi betragter en H^- ion som vekselvirker med en intens lineært polariseret laserpuls med få cykle. Laserpulsens beskrives, ligesom tidligere, ved vektorpotentialiet,

$$\vec{A}(t) = \begin{cases} -\frac{\epsilon_0(t)}{\omega} \sin\left(\omega\left(t - \frac{\tau}{2}\right) + \phi\right) \hat{z} & \text{for } t \in [0; \tau] \\ \vec{0} & \text{ellers} \end{cases}$$

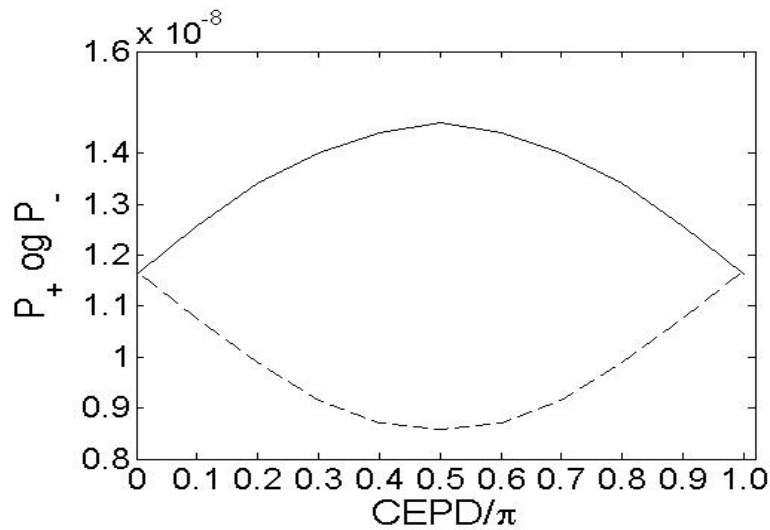
hvor ω er vinkelfrekvensen, τ er pulslængden, ϕ er CEPD, og ϵ_0 er indhyldningskurven. Indhyldningskurven er givet ved,

$$\epsilon_0(t) = E_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) \quad (106)$$

hvor E_0 er den maksimale feltstyrke. Figur 11 viser vores resultater. Sandsynlighederne P_+ og P_- er defineret i sektion 6.2.3. Igen ser vi, at asymmetrien er størst for $\phi = \frac{\pi}{2}$, mens den forsvinder for $\phi = 0$. Bemærk at $\frac{P_+}{P_-} \approx 1,7$ når den er maksimal. Der er altså igen muligt at opnå en betydelig asymmetri i fotoelektronens angulære fordeling.

Resultaterne er i perfekt overensstemmelse med 2 trins modellen. I første trin løsrives elektronen til tiden $t = t_0$. Herefter bevæger fotoelektronen sig som en klassisk partikel, med starthastighed 0, påvirket af kraften $\vec{F} = -\vec{E}$.

Resultaterne fra sektion 6.2.3 kan nu direkte overføres. For $\phi = \frac{\pi}{2}$ giver modellen $P_+ > P_-$, mens modellen giver $P_+ = P_-$ for $\phi = 0$. Dette er i perfekt overensstemmelse med vores kvantemekaniske beregning. Her har vi naturligvis heller ikke problemet med Coulomb potentialiet, som vi så i sektion 6.2.3



Figur 11: Sandsynlighederne P_+ (den fuldt optrukne kurve) og P_- (den stiplede kurve) som funktion af CEPD for en puls med $E_0 = 0,00053$, $\omega = 0,0043$, og $N = 4$ ($\lambda = 10,6\mu\text{m}$, $I = 1.0 \cdot 10^{10}\text{W}/\text{cm}^2$)

7 Konklusion

Den rumlige form af en laserpuls med få cykler afhænger drastisk af pulsens CEPD. Vi må derfor forvente, at alle fysiske processer induceret af pulsen afhænger af CEPD. Derfor er det vigtigt, at kunne kontrollere samt bestemme CEPD for en given puls. I dette projekt har vi set på stærkfeltsionisation af H og H^- via laserpulse med få cykler. Vi har undersøgt CEPD's indflydelse på fotoelektroens angulærefordeling. Vore beregninger bygger på beregning af ionisationssandsynligheden pr vinkel pr energi i Volkov hhv. Coulomb-Volkov approksimationen. De opnåede resultater for H i et lineært polariseret laserfelt er i overensstemmelse med [2]. Analysen i [2] er baseret på en numerisk løsning af Schrödinger ligningen.

Alle vore resultater viser, at man kan opnå en betydelig asymmetri ved hjælp af CEPD. Resultaterne for H i et cirkulært polariseret laserfelt og H^- i et lineært polariseret felt er i god overensstemmelse med en semiklassisk beskrivelse af systemerne.

Vi konkludere, at det er muligt at beskrive CEPD's effekt på den angulære fordeling ved hjælp af vore approksimationer. Vores resultater indikerer, at det er muligt at måle CEPD for en given puls ved brug af fotoemission og Volkov/Coulomb-Volkov approksimationen.

Litteratur

- [1] M. Peplow. *Electron movements pinned down to the split second* Nature **427**, 767 (2004).
- [2] Szczepan Chelkowski and André D. Bandrauk. *Sensitivity of spatial photoelectron distributions to the absolute phase of an ultrashort intense laser pulse* Phys. Rev. A **65**, 061802(R) (2002).
- [3] B.H. Bransden and C.J. Joachain. *Physics of Atoms and Molecules* 2nd ed. (Prentice Hall, 2003).
- [4] L. B. Madsen. *Gauge invariance in the interaction between atoms and few-cycle laser pulses*. Phys. Rev. A **65**, 053417 (2002).
- [5] L. B. Madsen. *Strong-field approximation in laser-assisted dynamics* Am. J. Phys. **73**, 57 (2005).
- [6] H. C. Day, B. Piraux and R. M. Potvliege. *Multistate non-Hermitian Floquet dynamics in short laser pulses* Phys. Rev. A **61**, 031402(R) (2000).
- [7] G. F. Gribakin and M. Yu. Kuchiev. *Multiphoton detachment of electrons from negative ions* Phys. Rev. A **55**, 5 (1996).
- [8] G. Duchateau, E. Cormier, and R. Gayet. *Coulomb-Volkov approach of ionization by extreme-ultraviolet laser pulses in the subfemtosecond regime* Phys. Rev. A **66**, 023412 (2002).
- [9] L. J. Slater. *Confluent Hypergeometric Functions* (Cambridge University Press, 1960).
- [10] M. R. C. McDowell and J. P. Coleman. *Introduction to the Theory of Ion-Atom Collisions* (North-Holland, Amsterdam, 1970).
- [11] R. N. Hill. *Proof That The H^- Ion Has Only One Bound State* Phys. Rev. Lett. **38**, 643 (1977).
- [12] B. H. Armstrong. *Empirical Analysis of the H^- Photodetachment Cross Section* Phys. Rev. **131**. 3 (1963).
- [13] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran* 2nd ed. (Cambridge University Press, 1992).
- [14] V. D. Rodriguez, E. Cormier, and R. Gayet. *Ionization by short uv laser pulses: Secondary above-threshold-ionization peaks of the electron spectrum investigated through a modified Coulomb-Volkov approach* Phys. Rev. A **69**, 053402 (2004).
- [15] S. Chelkowski, M. Zamojski, and A. D. Bandrauk. *Laser-phase directional control of photofragments in dissociative ionization of H_2^+ using two color intense laser pulses* Phys. Rev. A **63**, 023409 (2001)

- [16] D. B. Milosevic, G. G. Paulus, and W. Becker. *Phase-Dependent Effects of a Few-Cycle Laser Pulse* Phys. Rev. Lett. **89**, 15 (2002).