

Diplomarbeitvortrag

von

Peer Mumcu

**Institut für Theoretische Physik A
Lehr- und Forschungsgebiet Laserphysik
RWTH Aachen**

Überblick

Streuung in starken Laserfeldern

1-Teilchen Schrödingergleichung, analytische und numerische Methoden

- 1.** Das klassische, instantane Stoßmodell
- 2.** Quantenmechanische Reflexion an einer unendlich hohen Potentialstufe im Laserfeld
- 3.** Quantenmechanische Potentialstreuung im Laserfeld

Atomares Einheitensystem

Alle Größen dimensionslos

Skalierungsfaktoren charakteristisch für das Wasserstoffatom

$$\hbar = m_e = e = 1$$

Atomare Energieeinheit = 27.2 eV

Atomare Längeneinheit = $5.3 \cdot 10^{-11}$ m


Atomare Feldstärkeeinheit = $5.1 \cdot 10^{11}$ V/m (entspricht $I = 3.5 \cdot 10^{16}$ W/cm²)

Atomare Frequenzeinheit = $4.1 \cdot 10^{16}$ Hz (entspricht $\lambda = 46$ nm)

Das klassische Modell der instantanen Stöße

Bewegung im Laserfeld $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \sin(\omega t)$

\Rightarrow Impuls = Driftimpuls + Schwingungsimpuls

$$p = k + v(t)$$


Schwingungsimpuls: $v(t) = v_0 \cos(\omega t), \quad v_0 = \frac{\mathcal{E}_0}{\omega}$

Das klassische Modell der instantanen Stöße

Elastischer Stoß zum Zeitpunkt t' (bei konstantem Laserfeld):

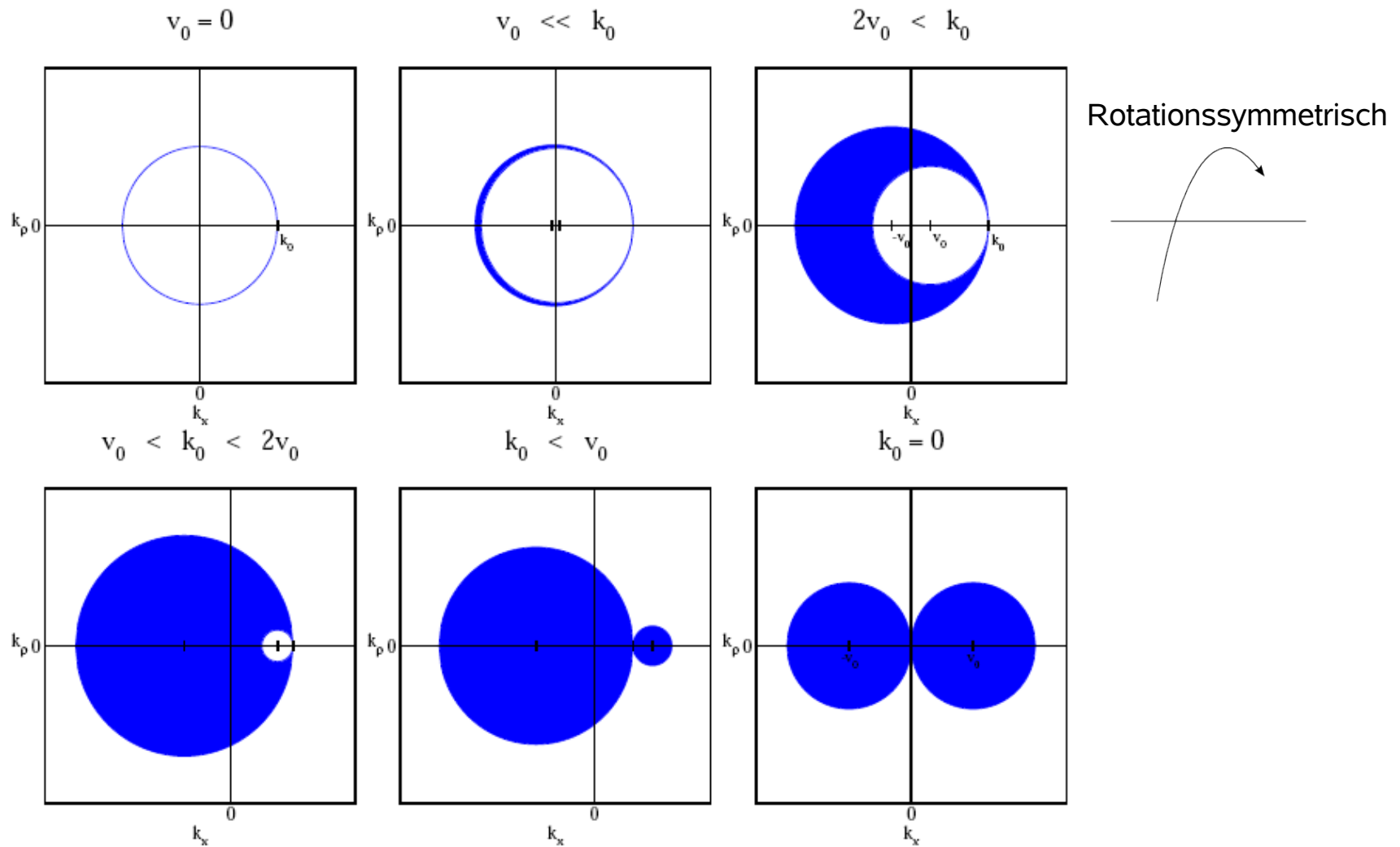
$$(\mathbf{k} + \mathbf{v}(t'))^2 = (\mathbf{k}_0 + \mathbf{v}(t'))^2$$

Driftimpuls nach dem Stoß

Driftimpuls vor dem Stoß

Interessante Größe: \mathbf{k} bzw. $E = \frac{k^2}{2}$

Mögliche Driftimpulse nach einem Stoß



Maximaler Driftimpuls lässt sich ablesen

Erweiterung des Modells auf zwei Stöße

Energieerhaltung beim 1. Stoß $(\mathbf{k}' + \mathbf{v}(t'))^2 = (\mathbf{k}_0 + \mathbf{v}(t'))^2$

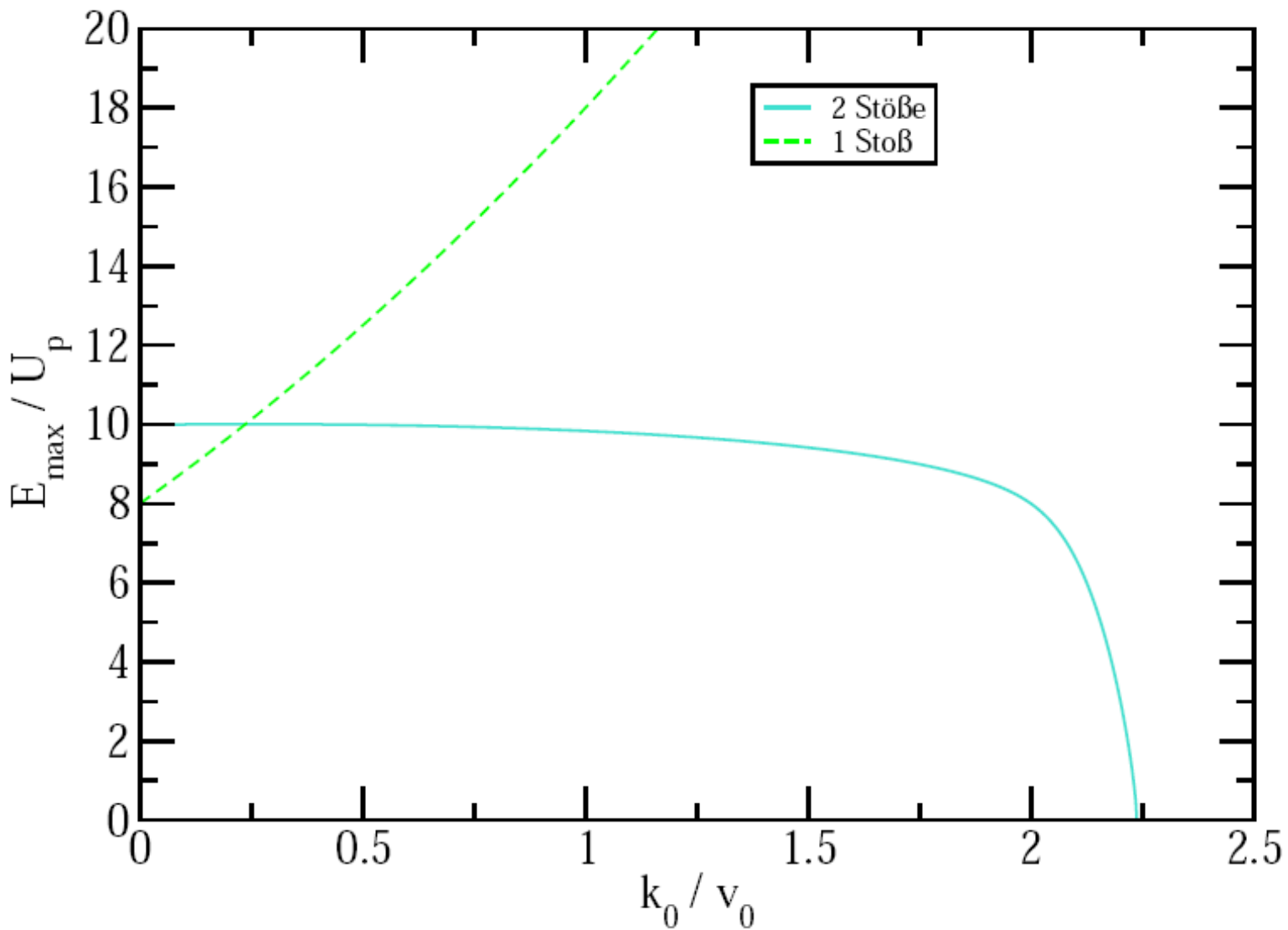
Rückkehr zum Streuzentrum $\int_{t'}^{t''} dt (\mathbf{k}' + \mathbf{v}(t)) = 0$

Energieerhaltung beim 2. Stoß $(\mathbf{k} + \mathbf{v}(t''))^2 = (\mathbf{k}' + \mathbf{v}(t''))^2$

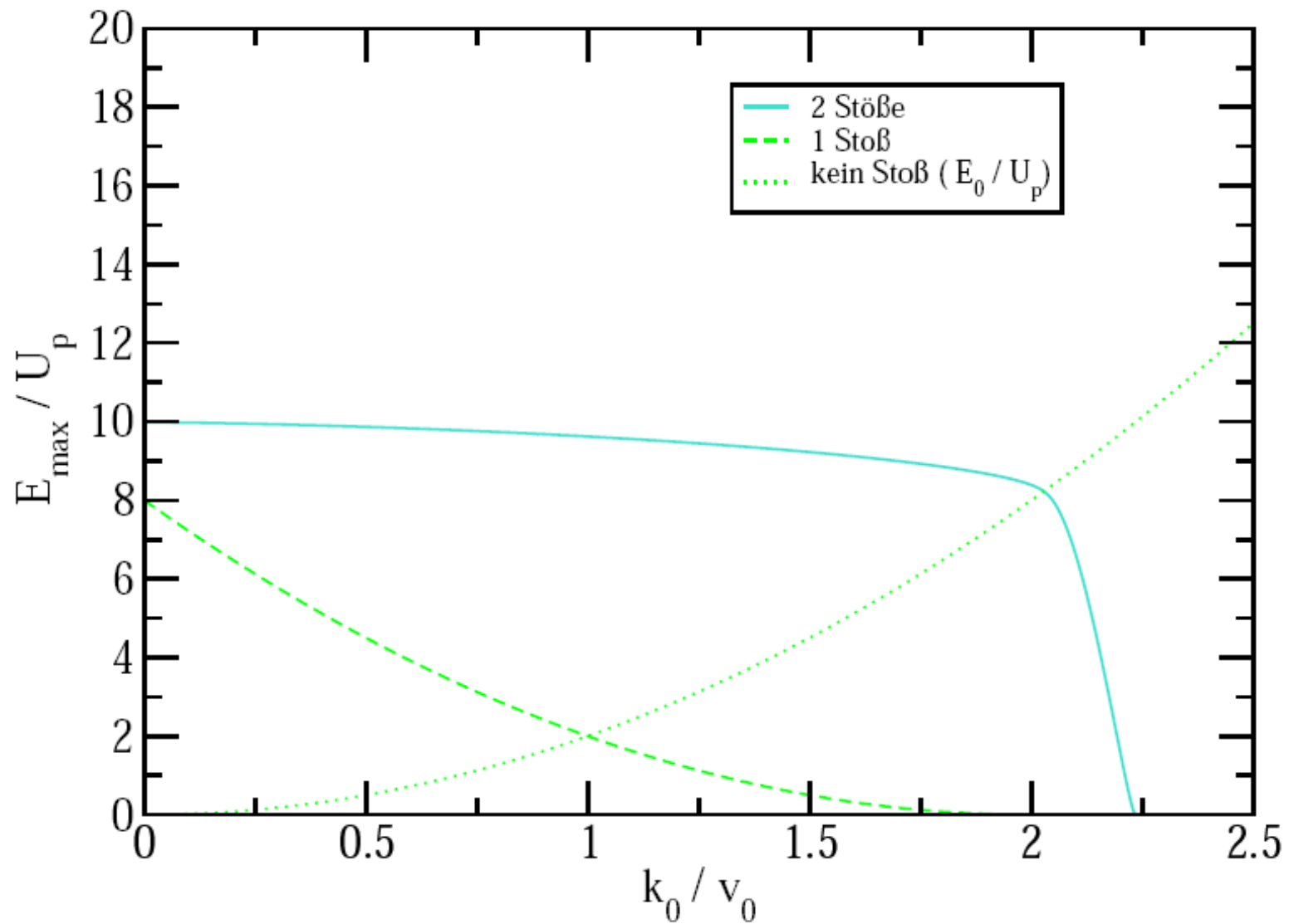
Skalierung mit dem ponderomotorischen Potential $U_p = \frac{v_0^2}{4} = \frac{\mathcal{E}_0^2}{4\omega^2}$

Numerische Berechnung des maximalen Driftimpulses

Energiecutoffs für reflektierte Elektronen (1D)

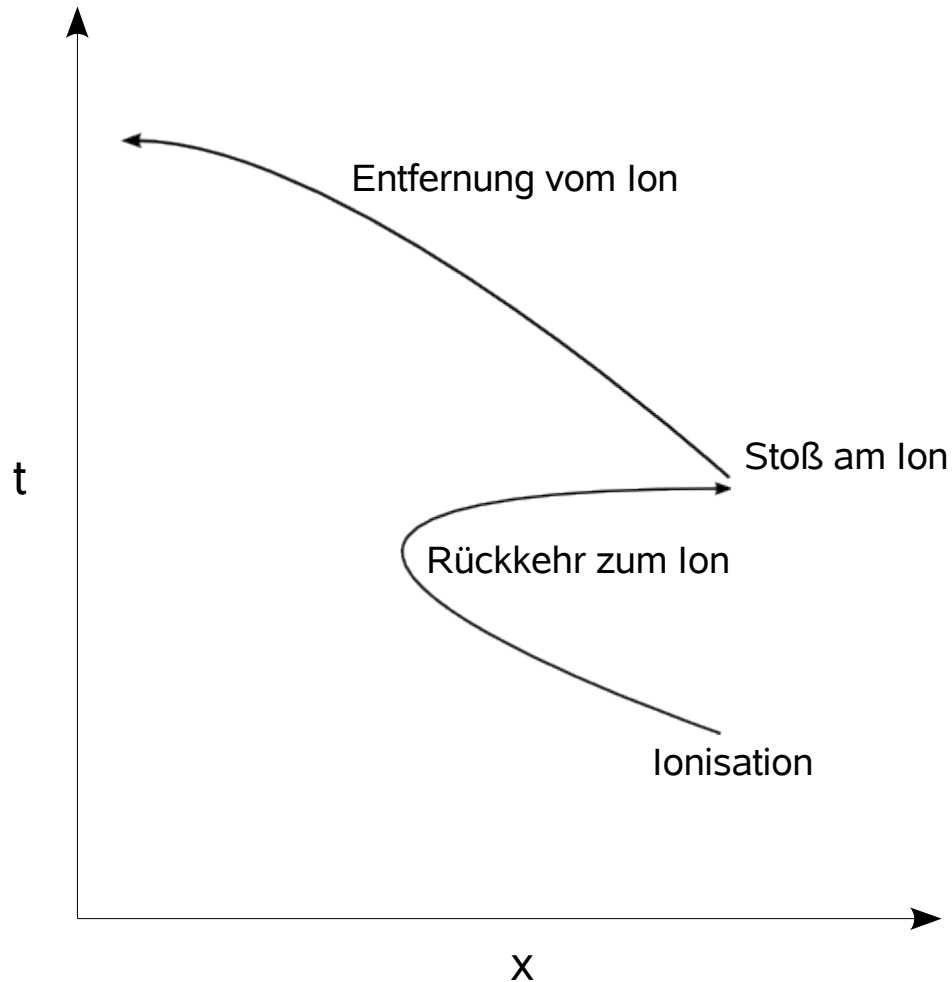


Energiecutoffs für transmittierte Elektronen (1D)

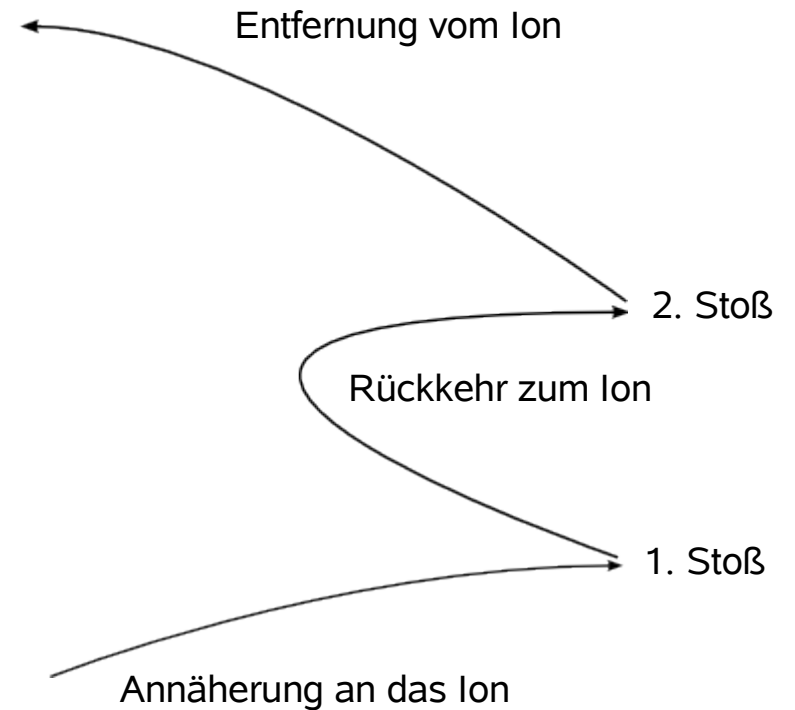


Zusammenhang zwischen Stoßprozessen 2. Ordnung und Above-Threshold Ionization (ATI)

ATI



Reines Streuproblem



Quantenmechanische Streuung im Laserfeld

Laserfeld: $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \sin(\omega t)$

Streupotential: $V(\mathbf{x})$

Längeneichung:

$$i\partial_t|\Psi\rangle = \left(\frac{p^2}{2} + \mathbf{x} \cdot \mathcal{E}(t) + V(\mathbf{x}) \right) |\Psi\rangle$$

Quantenmechanische Streuung im Laserfeld

Laserfeld: $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \sin(\omega t)$

Streupotential: $V(\mathbf{x})$

Längeneichung:

$$i\partial_t|\Psi\rangle = \left(\frac{p^2}{2} + \mathbf{x} \cdot \mathcal{E}(t) + V(\mathbf{x}) \right) |\Psi\rangle$$

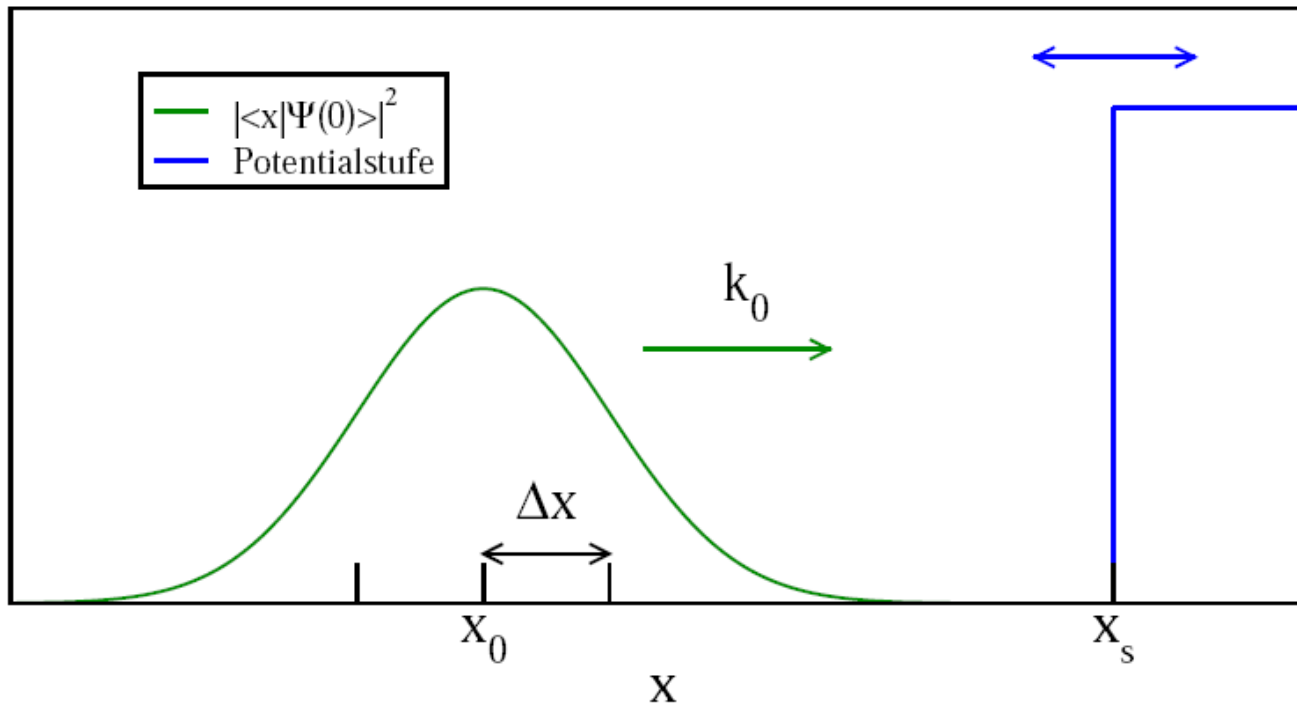
Kramers-Henneberger-System:

$$i\partial_t|\Psi\rangle = \left(\frac{p^2}{2} + V(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}(t)) \right) |\Psi\rangle \quad \boldsymbol{\xi}(t) = \frac{\mathcal{E}_0}{\omega^2} \sin(\omega t)$$

oszillierendes Potential Verschiebung

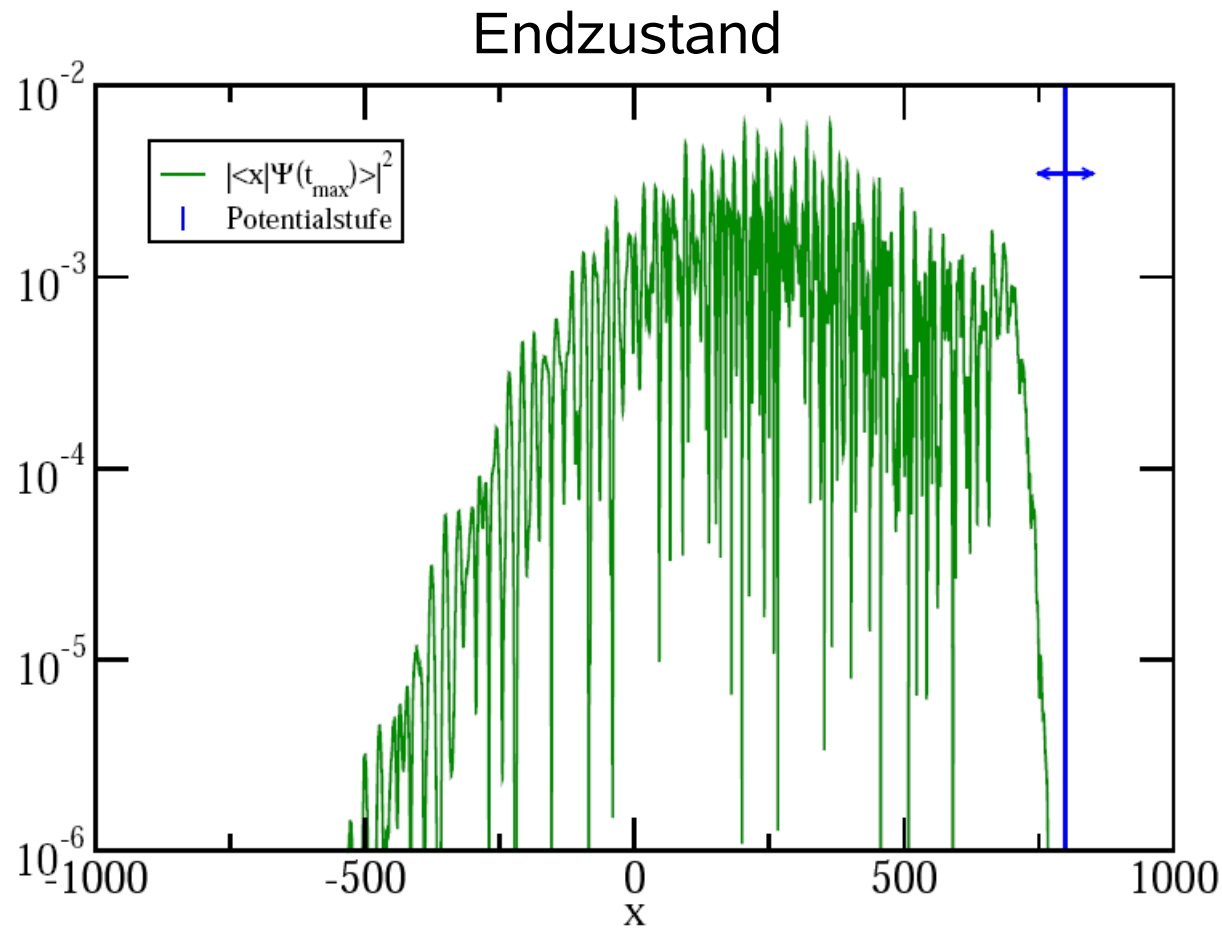
Streuung an einer unendlich hohen Potentialstufe (numerische Berechnung)

Anfangszustand



1. Numerische Lösung der Schrödingergleichung (1D, Crank-Nicolson-Algorithmus)

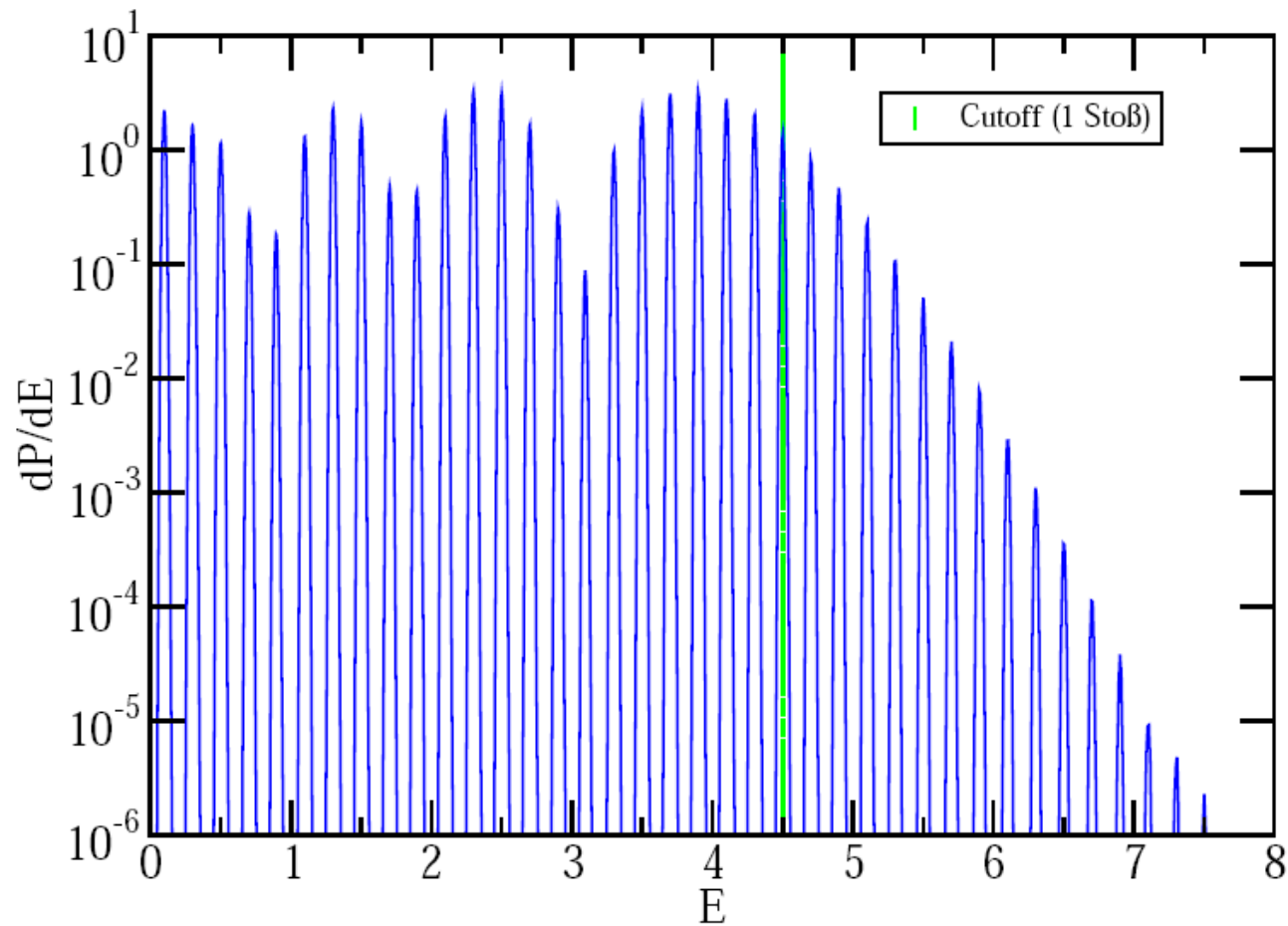
Streuung an einer unendlich hohen Potentialstufe (numerische Berechnung)



2. Berechnung der Verteilung der asymptotischen Energie $E = \frac{k^2}{2}$ mit Hilfe einer räumlichen FFT

Wahrscheinlichkeitsdichte für die asymptotische Energie (numerische Berechnung)

Multiphotonenpeaks bei den Energien $E_n = E_0 + n\omega$ ($E_0 = \frac{k_0^2}{2}$)

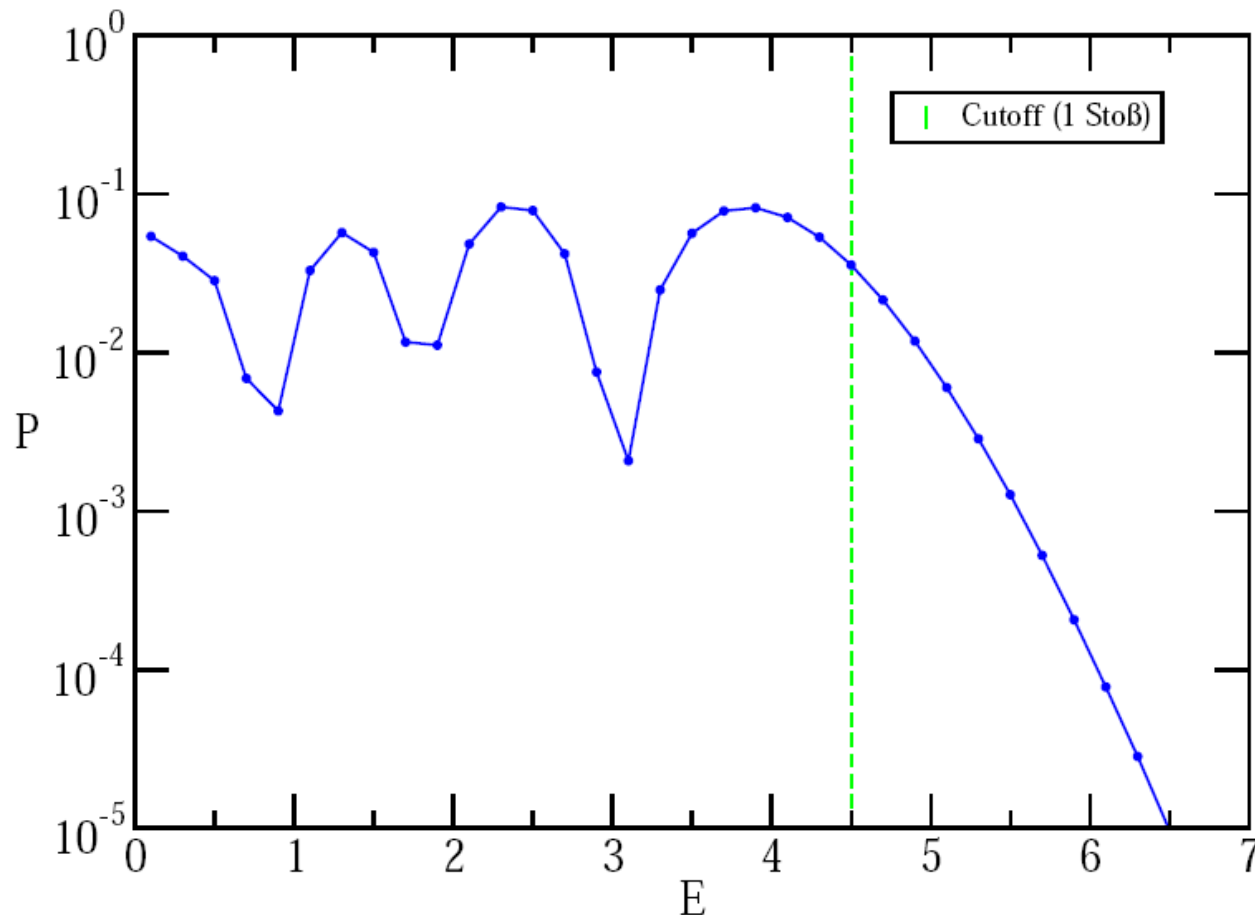


Parameter: $k_0 = v_0 = 1$ ($\mathcal{E}_0 = \omega = 0.2$)

Photonen-Absorptionswahrscheinlichkeiten (numerische Berechnung)

Wahrscheinlichkeit für die Absorption von genau n Photonen = Fläche unter dem Peak

$$P(E_n) = \int_{E_n - \frac{\epsilon}{2}}^{E_n + \frac{\epsilon}{2}} \frac{dP}{dE} dE \quad (\text{diskrete Verteilung})$$



Analytische Beschreibung der Streuung

Der Volkov-Zustand $|k(t)\rangle$ beschreibt ein Elektron mit festem Driftimpuls k im Laserfeld

Gesucht ist das Übergangsmatrixelement

$$\begin{aligned} M &= \langle k(t) | U(t, 0) | k_0(0) \rangle \\ &= \int \int dx_1 dx_0 \langle k(t) | x_1 \rangle \langle x_1 | U(t, 0) | x_0 \rangle \langle x_0 | k_0(0) \rangle \end{aligned}$$

Analytische Beschreibung der Streuung

Der Volkov-Zustand $|k(t)\rangle$ beschreibt ein Elektron mit festem Driftimpuls k im Laserfeld

Gesucht ist das Übergangsmatrixelement

$$\begin{aligned} M &= \langle k(t) | U(t, 0) | k_0(0) \rangle \\ &= \int \int dx_1 dx_0 \langle k(t) | x_1 \rangle \langle x_1 | U(t, 0) | x_0 \rangle \langle x_0 | k_0(0) \rangle \end{aligned}$$

Pfadintegraldarstellung des Propagators:

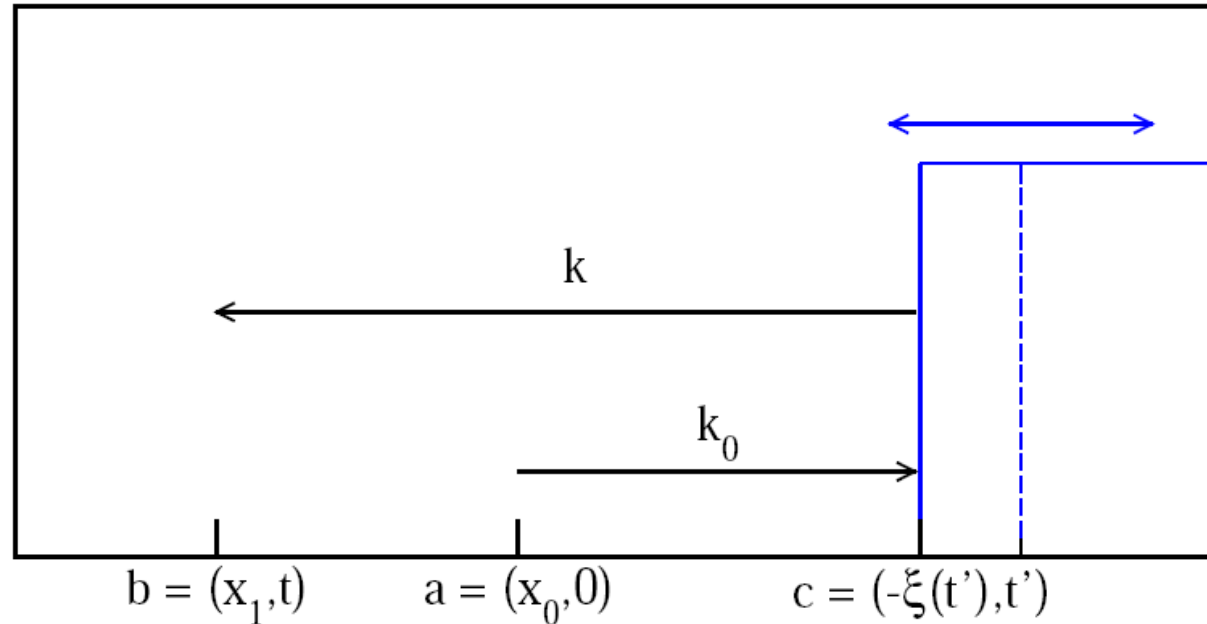
Integration über alle
Trajektorien von a nach b

$$\langle x_1 | U(t, 0) | x_0 \rangle = \int_a^b e^{iS} \mathcal{D}x(\tau) = K(b, a).$$

$$a = (x_0, 0), \quad b = (x_1, t), \quad S = \int_0^t d\tau \mathcal{L}, \quad \mathcal{L} = \frac{1}{2} \dot{x}^2$$

Ortskoordinate Zeitkoordinate

1. Bornsche Näherung



1-Stoß Näherung:
$$K(b,a) \approx \int_0^t dt' K^{(0)}(b,c) K^{(0)}(c,a)$$

Propagator eines freien Elektrons:
$$K^{(0)}(\beta,\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2\pi i(t_\beta - t_\alpha)}} \exp\left(\frac{i(x_\beta - x_\alpha)^2}{2(t_\beta - t_\alpha)}\right), \quad \alpha = (x_\alpha, t_\alpha), \quad \beta = (x_\beta, t_\beta)$$

1. Bornsche Näherung

$$\implies M \approx M^{(1)} = \int_0^t dt' \exp \left(i(E - E_0)t' + i(k - k_0)\xi(t') \right)$$

Argument der exp-Funktion
stationär, wenn $(k + v(t'))^2 = (k_0 + v(t'))^2$

1. Bornsche Näherung

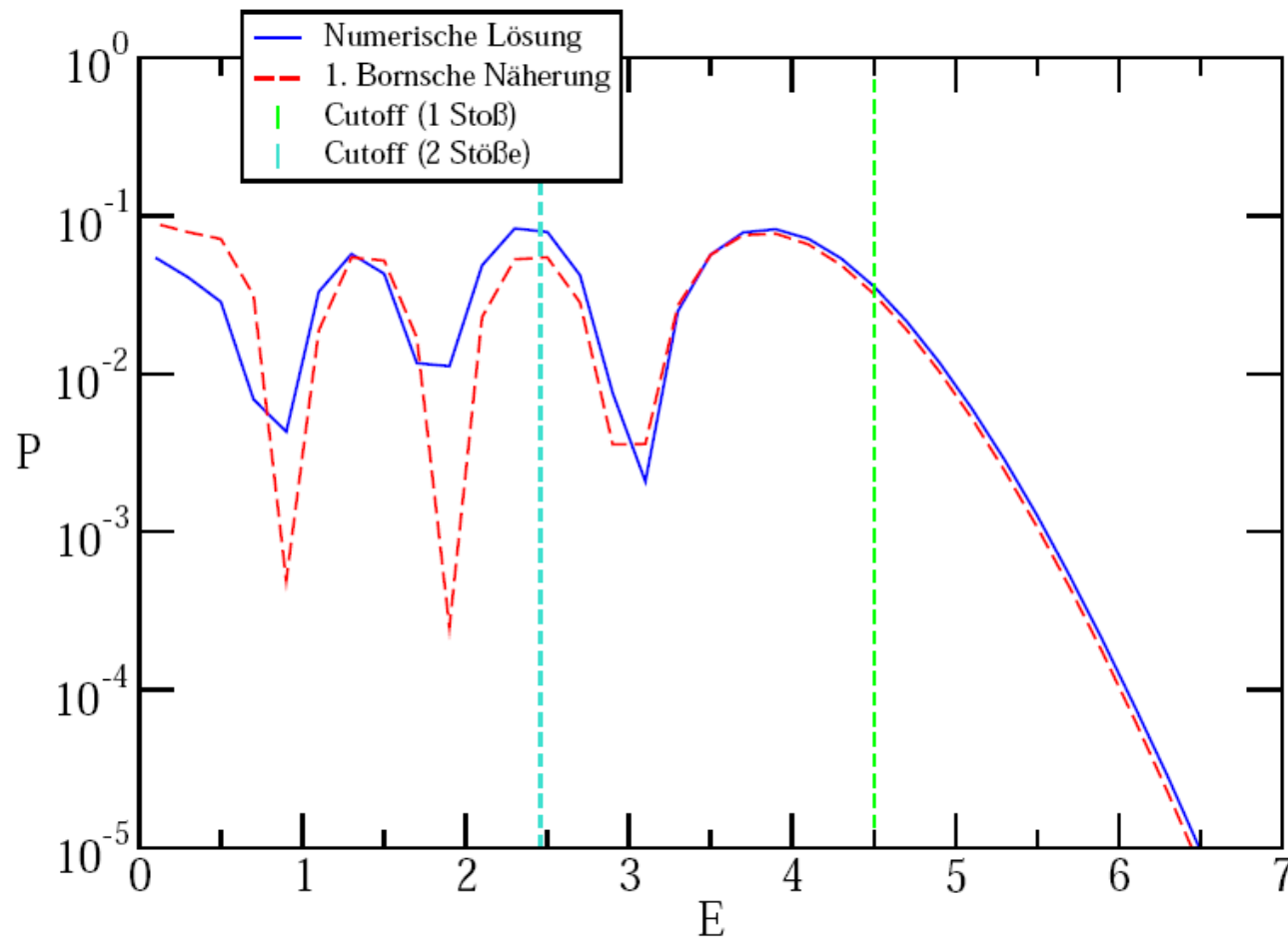
$$\implies M \approx M^{(1)} = \int_0^t dt' \exp\left(i(E - E_0)t' + i(k - k_0)\xi(t')\right)$$

Argument der exp-Funktion
stationär, wenn $(k + v(t'))^2 = (k_0 + v(t'))^2$

Verwende die Fourierreihe $e^{iz \sin(\omega t')} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} J_{-n}(z) e^{-in\omega t'}$

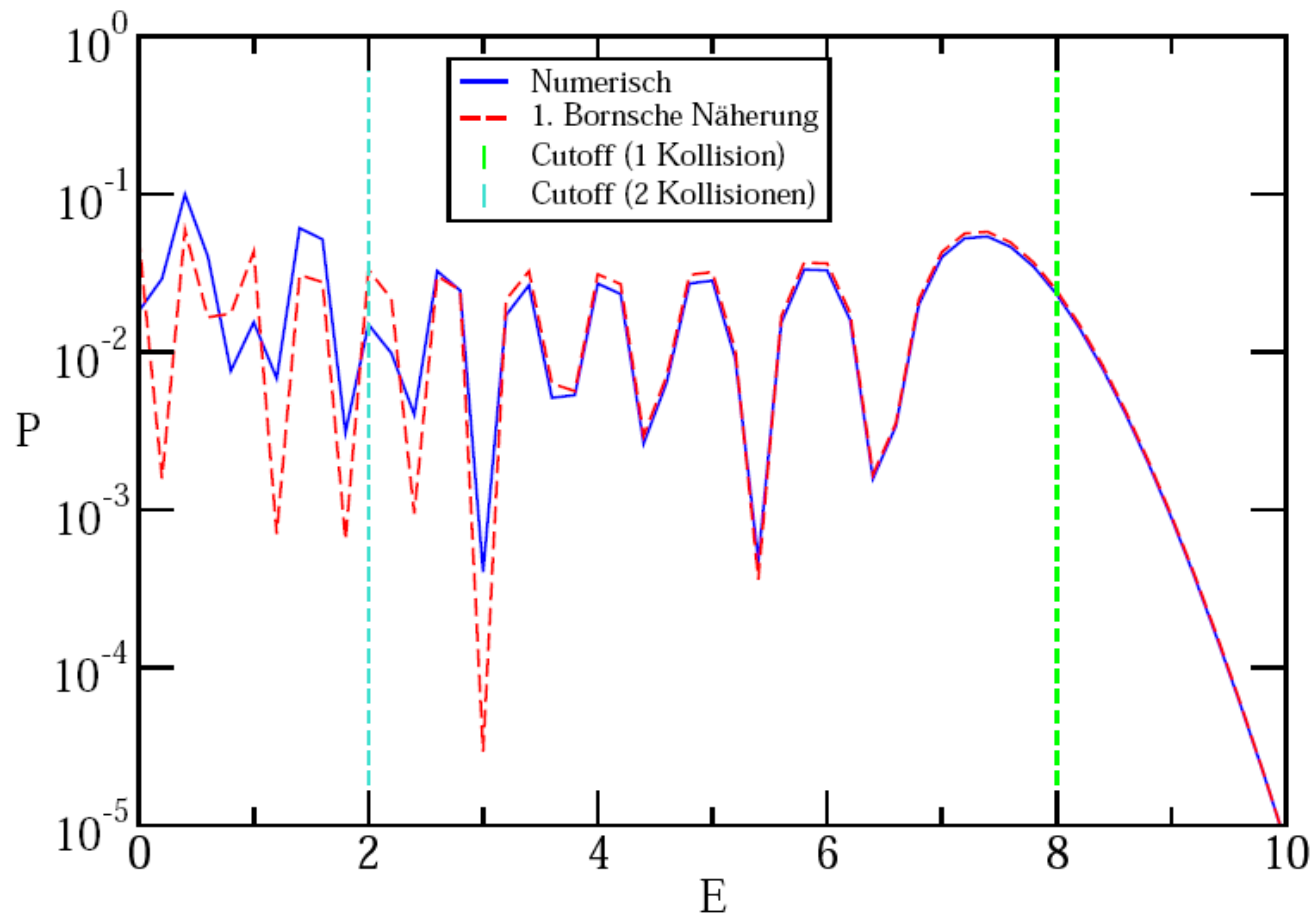
$$\implies P(E_n) = C J_n^2 \left(\frac{\sqrt{2}\mathcal{E}_0}{\omega^2} (\sqrt{E_n} + \sqrt{E_0}) \right)$$

Vergleich der 1. Bornschen Näherung mit numerischen Ergebnissen



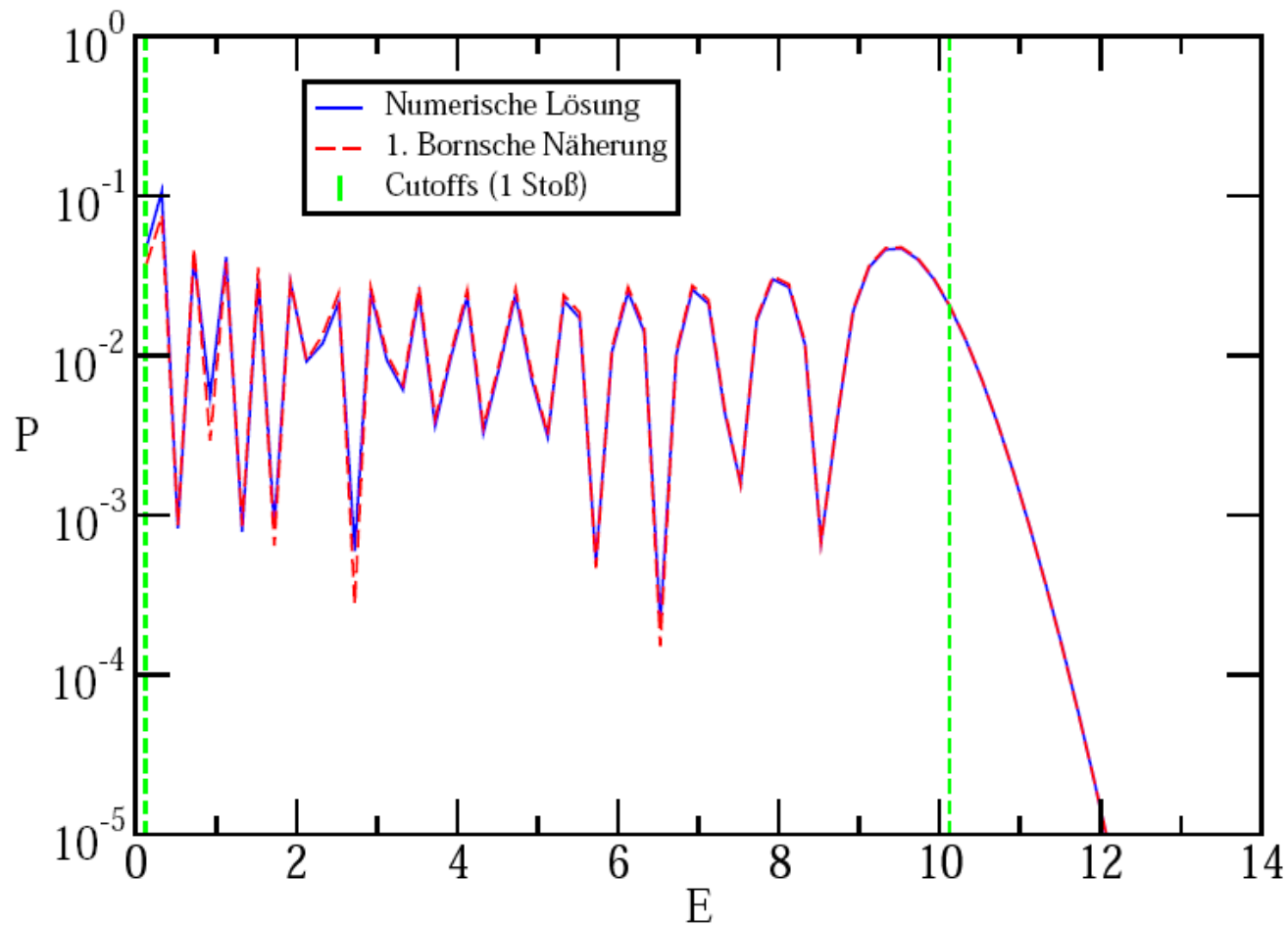
Parameter: $k_0 = v_0 = 1$ ($\mathcal{E}_0 = \omega = 0.2$)

Vergleich der 1. Bornschen Näherung mit numerischen Ergebnissen



Parameter: $k_0 = 2$, $v_0 = 1$ ($\mathcal{E}_0 = \omega = 0.2$)

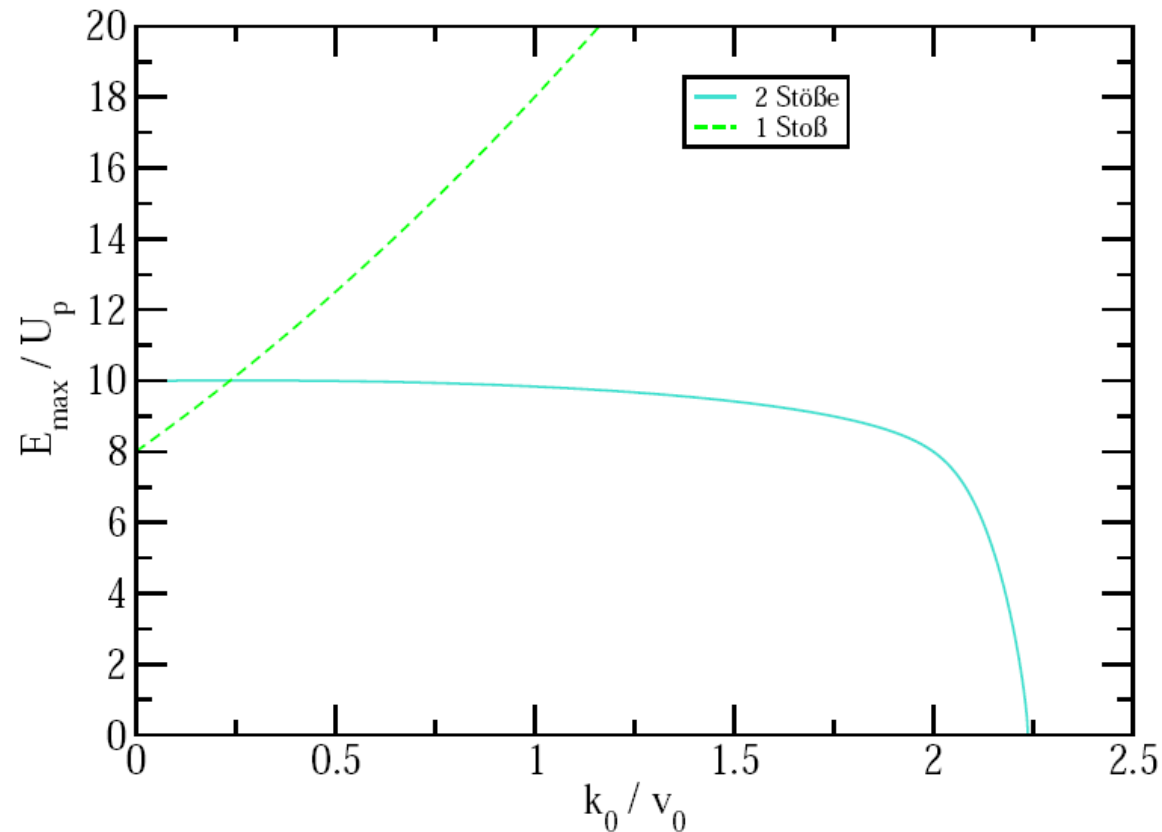
Vergleich der 1. Bornschen Näherung mit numerischen Ergebnissen



Parameter: $k_0 = 2.5$, $v_0 = 1$ ($\mathcal{E}_0 = \omega = 0.2$)

Kriterium für die Anwendbarkeit der 1. Bornschen Näherung

Energiecutoffs für reflektierte Elektronen im klassischen Stoßmodell:

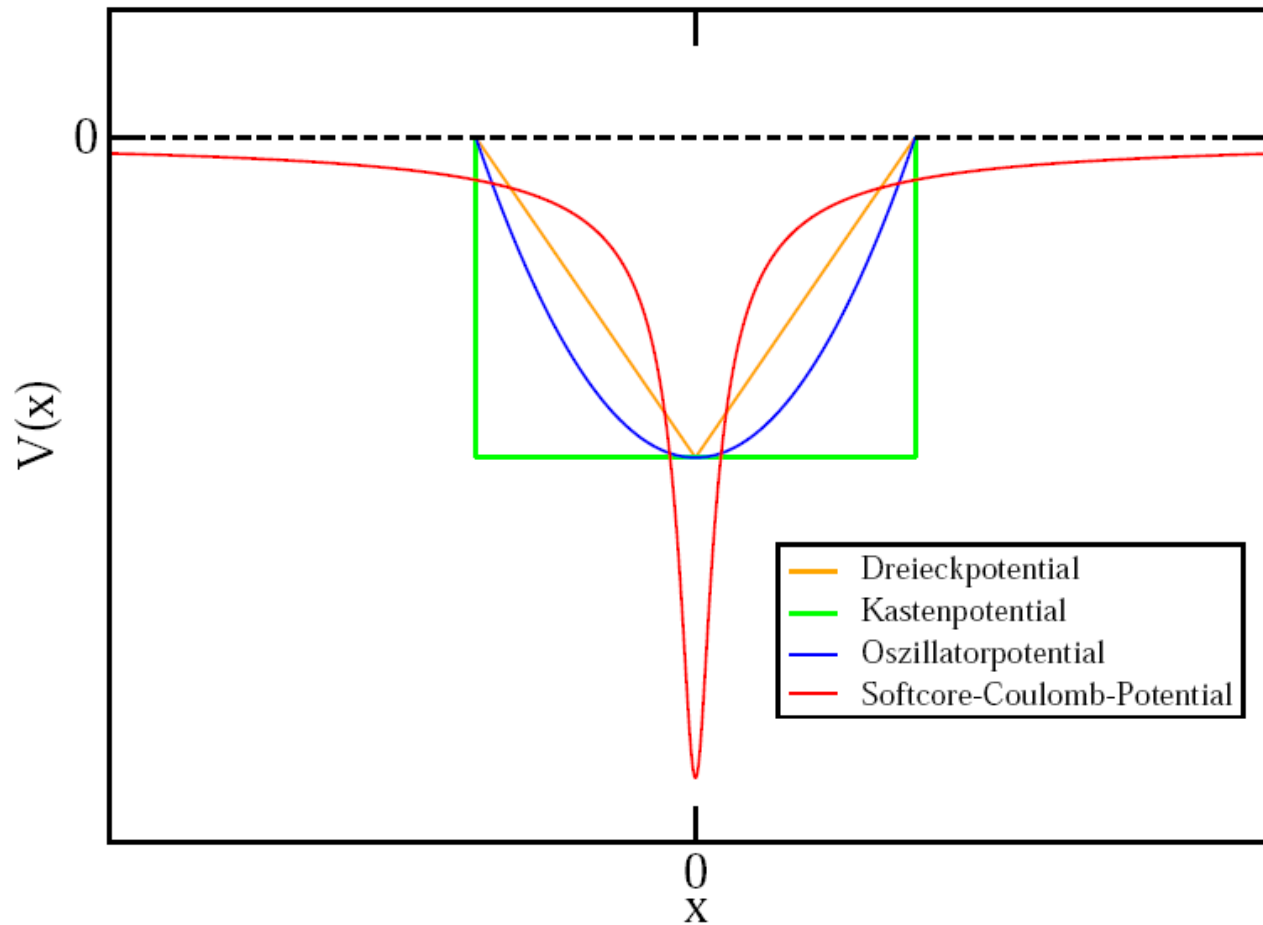


⇒ Die 1. Bornsche Näherung beschreibt das gesamte Energiespektrum richtig, falls

$$k_0 \gtrsim 2v_0$$

Potentialstreuung im Laserfeld

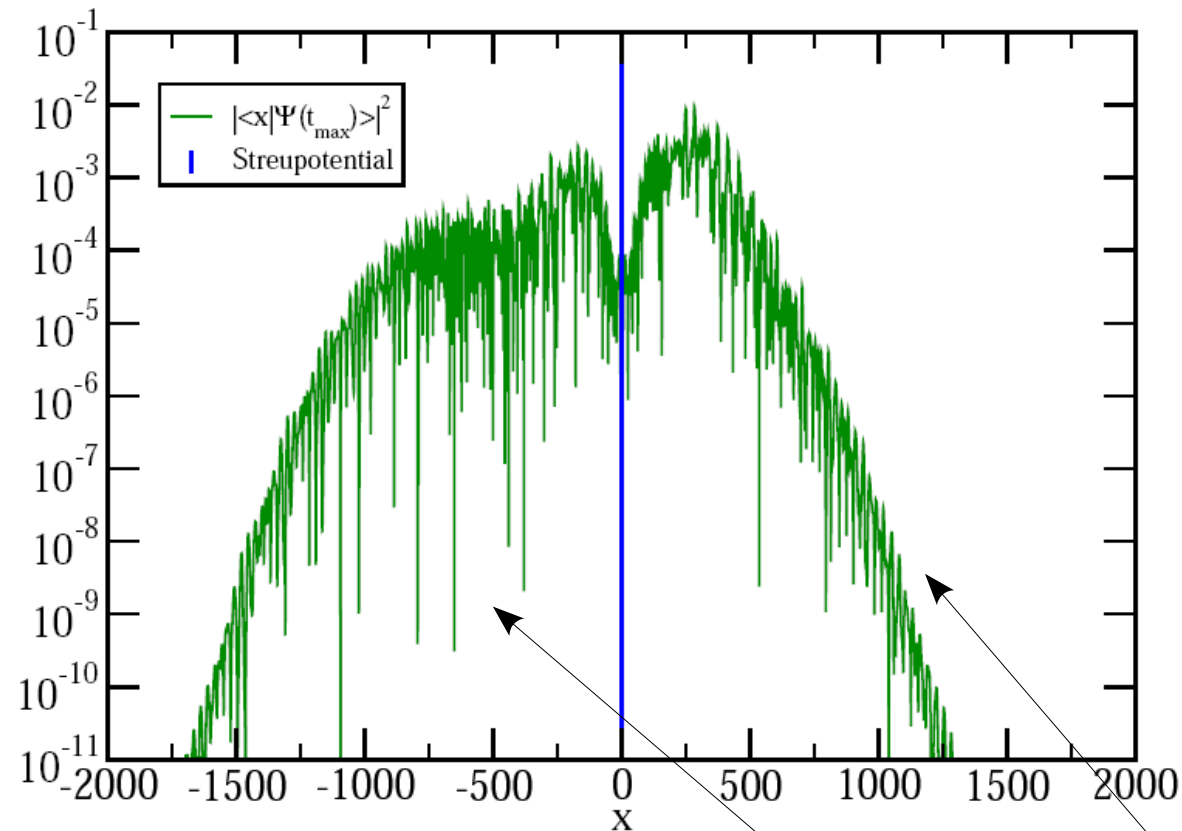
Modellpotentiale



Softcore-Coulomb-Potential:
$$V(x) = -\frac{Z}{\sqrt{x^2 + \epsilon^2}}$$

Potentialstreuung im Laserfeld (numerische Berechnung)

Aufenthaltswahrscheinlichkeit nach dem Streuvorgang

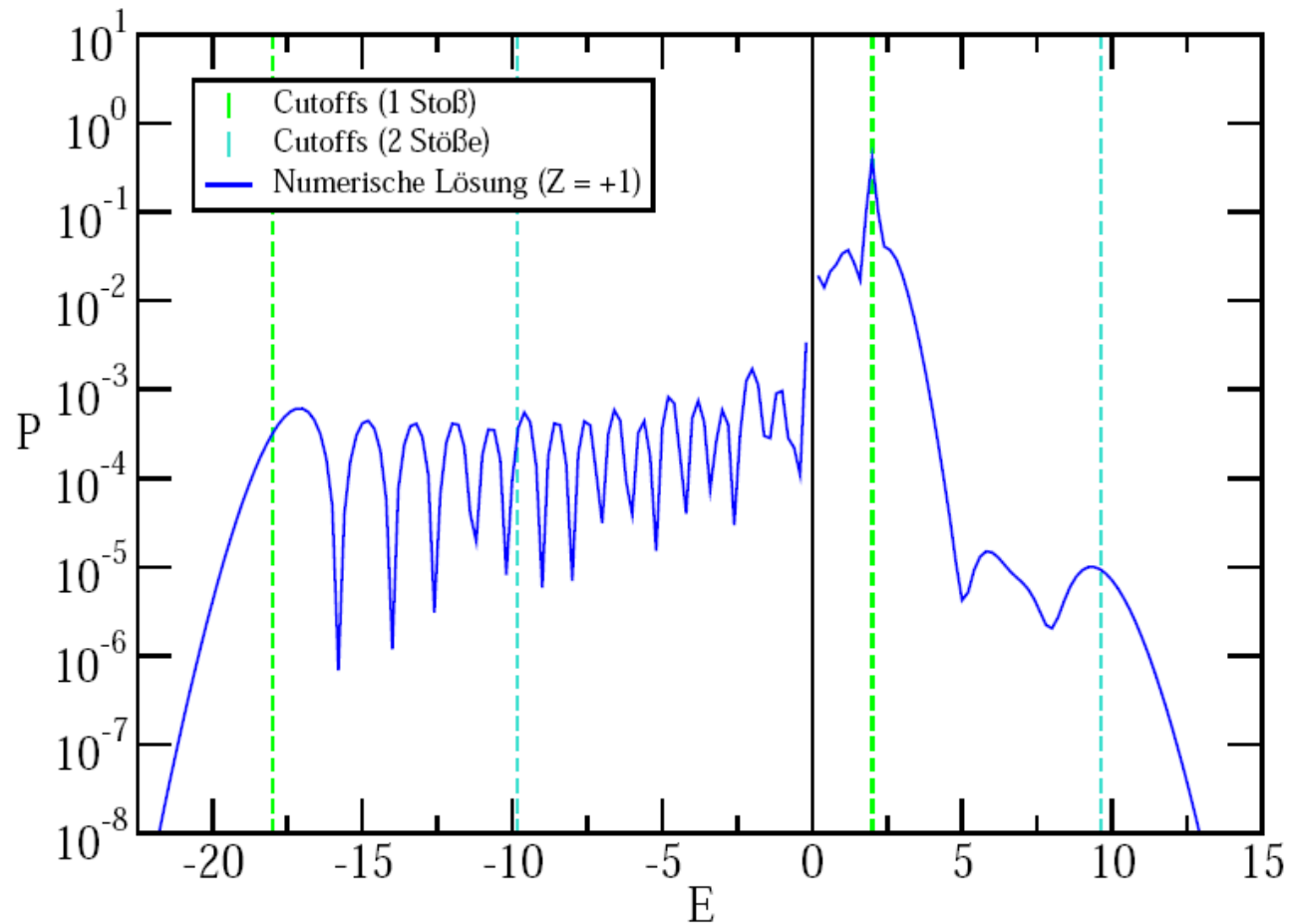


Getrennte Berechnung der Energieverteilung für reflektierten und transmittierten Anteil

Für reflektierten Anteil werden formal negative Energien verwendet

Numerisch berechnetes Energiespektrum

Energiespektrum nach der Streuung am Softcore-Coulomb-Potential



Parameter: $k_0 = v_0 = 2$ ($\mathcal{E}_0 = 0.4, \omega = 0.2$)

1. Bornsche Näherung für die Potentialstreuung im Laserfeld

Herleitung mit der Pfadintegralmethode, oder mit dem gewöhnlichen Ansatz:

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi(0)\rangle - i \int_0^t dt' V(x + \xi(t')) |\Psi(t')\rangle \quad (\text{Wechselwirkungsbild})$$

1. Bornsche Näherung für die Potentialstreuung im Laserfeld

Herleitung mit der Pfadintegralmethode, oder mit dem gewöhnlichen Ansatz:

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi(0)\rangle - i \int_0^t dt' V(x + \xi(t')) |\Psi(t')\rangle \quad (\text{Wechselwirkungsbild})$$

Approximiere den Zustand unter dem Integral: $|\Psi(t')\rangle \approx |\Psi(0)\rangle = |k_0\rangle$

$$\Rightarrow M = \langle k | \Psi(t) \rangle \approx \langle k | k_0 \rangle - i \int_0^t dt' \langle k | V(x + \xi(t')) | k_0 \rangle$$

$M^{(0)}$
(keine Wechselwirkung)

$M^{(1)}$
(1 Stoß)

1. Bornsche Näherung für die Potentialstreuung im Laserfeld

Potentialstreuung

$$\begin{aligned} M &\approx M^{(0)} + M^{(1)} \\ &= \langle k|k_0\rangle - i\langle k|V(x)|k_0\rangle \int_0^t dt' \exp\left(i(E - E_0)t' + i(k - k_0)\xi(t')\right) \end{aligned}$$

↑
Stoß ist an jedem Ort möglich, Gewichtung mit $V(x,t)$

1. Bornsche Näherung für die Potentialstreuung im Laserfeld

Potentialstreuung

$$\begin{aligned} M &\approx M^{(0)} + M^{(1)} \\ &= \langle k|k_0\rangle - i\langle k|V(x)|k_0\rangle \int_0^t dt' \exp\left(i(E - E_0)t' + i(k - k_0)\xi(t')\right) \end{aligned}$$

↑
Stoß ist an jedem Ort möglich, Gewichtung mit $V(x,t)$

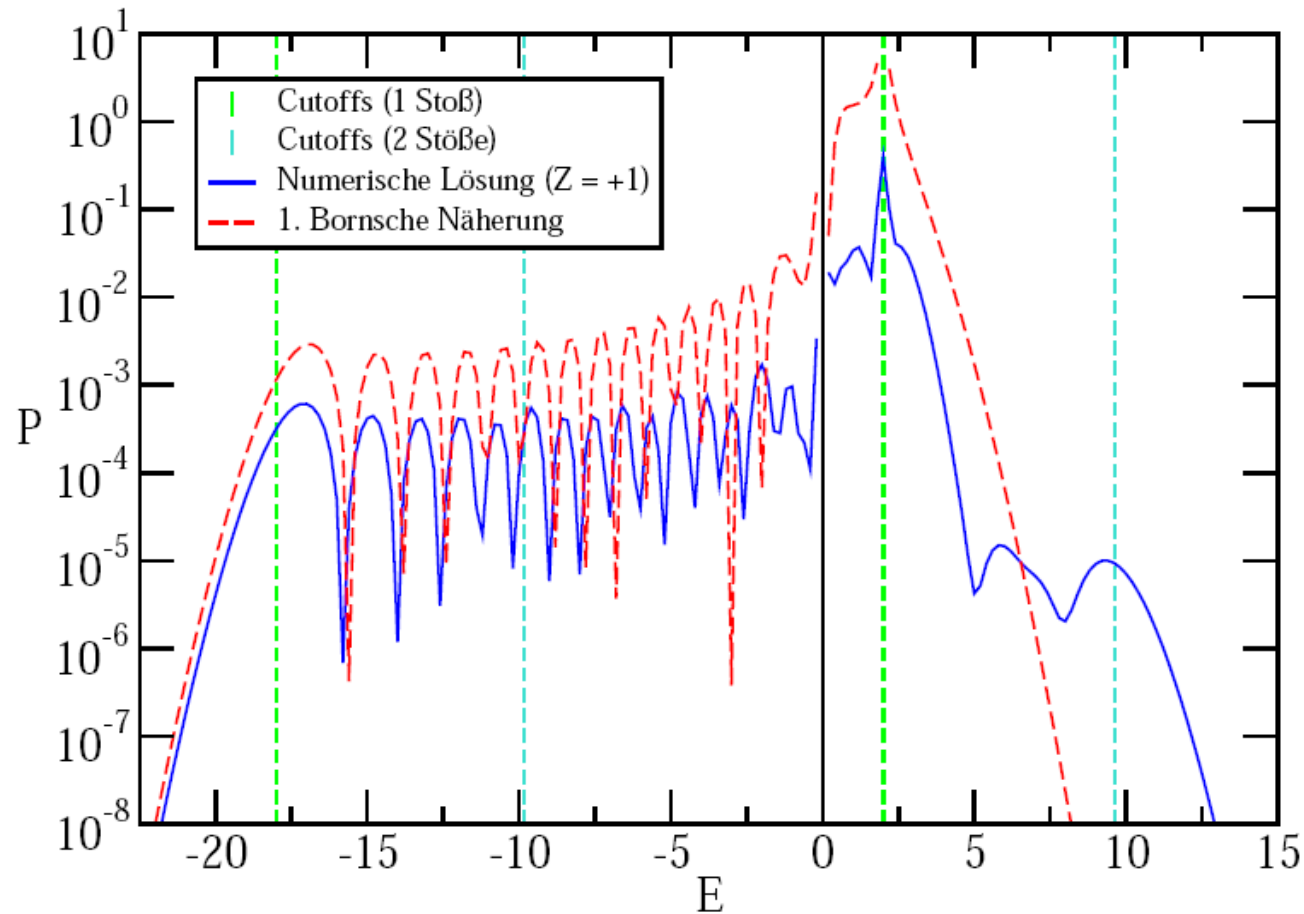
Reflexion an der unendlich hohen Potentialstufe

$$\begin{aligned} M &\approx M^{(1)} \\ &= \int_0^t dt' \exp\left(i(E - E_0)t' + i(k - k_0)\xi(t')\right) \end{aligned}$$

↑
Stoß ist nur an der Position der Stufe möglich

Vergleich der 1. Bornschen Näherung mit numerischen Ergebnissen

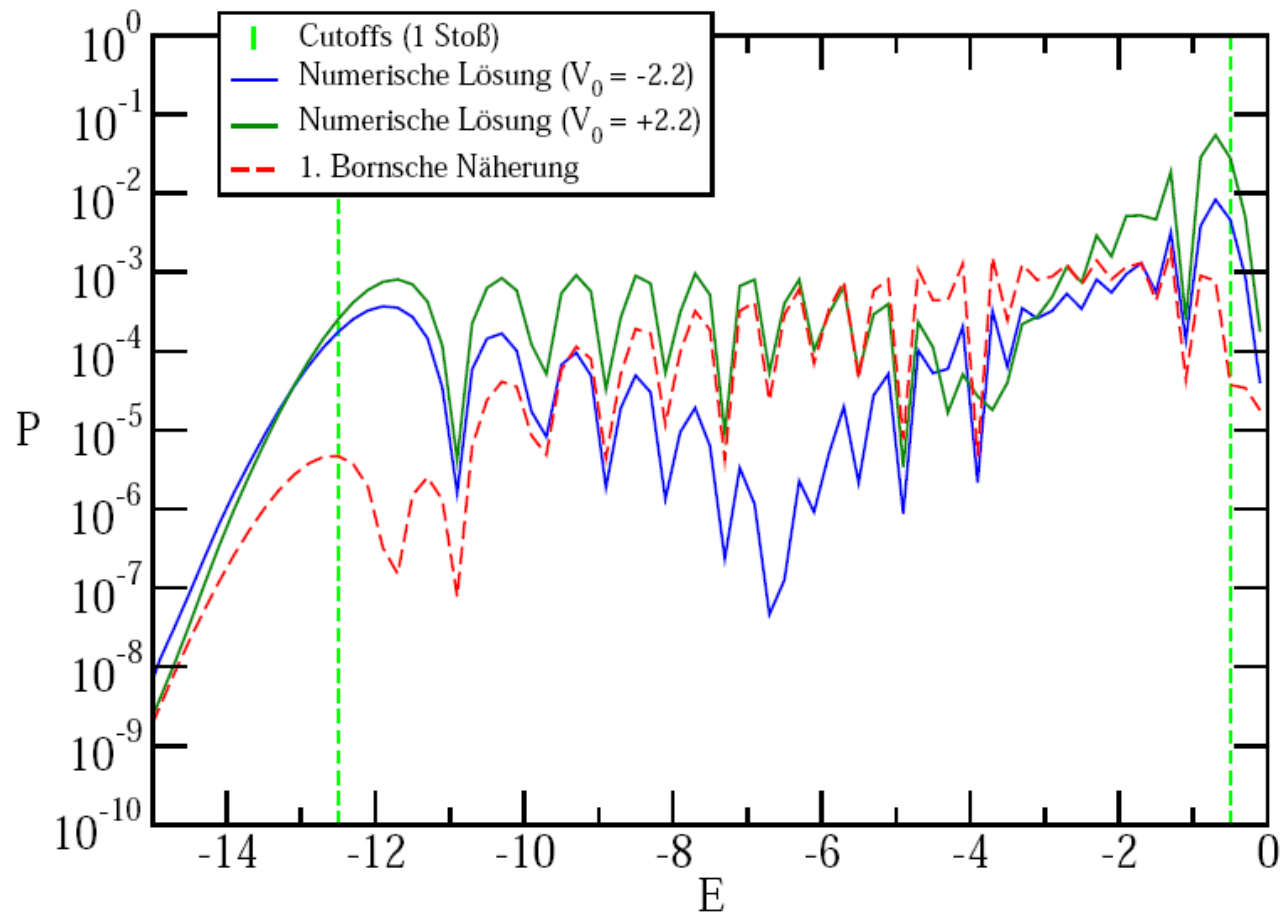
Energiespektrum nach der Streuung am Softcore-Coulomb-Potential



Parameter: $k_0 = v_0 = 2$ ($\mathcal{E}_0 = 0.4, \omega = 0.2$)

Vergleich der 1. Bornschen Näherung mit numerischen Ergebnissen

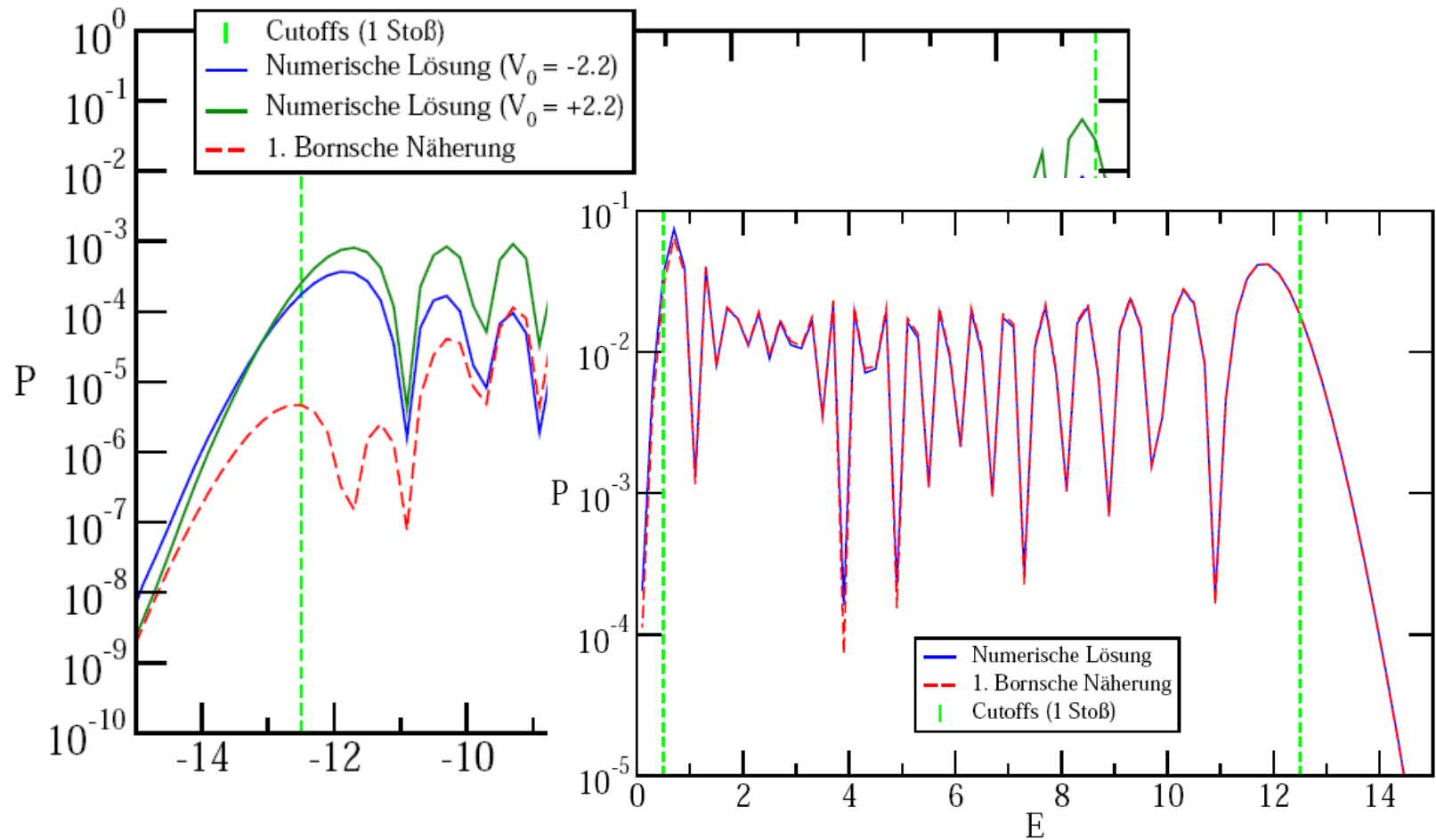
Energiespektrum nach der Streuung am Kastenpotential



Parameter: $k_0 = 3$, $v_0 = 1$ ($\mathcal{E}_0 = \omega = 0.2$)

Vergleich der 1. Bornschen Näherung mit numerischen Ergebnissen

Energiespektrum nach der Streuung am Kastenpotential



Parameter: $k_0 = 3$, $v_0 = 1$ ($\mathcal{E}_0 = \omega = 0.2$)

2. Bornsche Näherung

$$M \approx M^{(0)} + M^{(1)} + M^{(2)}$$

$$M^{(2)} = - \int_0^t dt'' \int_0^{t''} dt' \int dk' \langle k|V(x)|k'\rangle \langle k'|V(x)|k_0\rangle \\ \times \exp\left(i(E - E')t'' + i(k - k')\xi(t'') + i(E' - E_0)t' + i(k' - k_0)\xi(t')\right)$$

2. Bornsche Näherung

$$M \approx M^{(0)} + M^{(1)} + M^{(2)}$$

$$M^{(2)} = - \int_0^t dt'' \int_0^{t''} dt' \int dk' \langle k|V(x)|k'\rangle \langle k'|V(x)|k_0\rangle \\ \times \exp\left(i(E - E')t'' + i(k - k')\xi(t'') + i(E' - E_0)t' + i(k' - k_0)\xi(t')\right)$$

Argument der exp-Funktion
stationär, wenn

$$\begin{aligned} (k' + v(t'))^2 &= (k_0 + v(t'))^2 \\ \int_{t'}^{t''} dt (k' + v(t)) &= 0 \\ (k + v(t''))^2 &= (k' + v(t''))^2 \end{aligned}$$

\implies 2. Bornsche Näherung liefert richtige Cutoffs für zwei Stöße

2. Bornsche Näherung

$$M \approx M^{(0)} + M^{(1)} + M^{(2)}$$

$$M^{(2)} = - \int_0^t dt'' \int_0^{t''} dt' \int dk' \langle k|V(x)|k'\rangle \langle k'|V(x)|k_0\rangle \\ \times \exp\left(i(E - E')t'' + i(k - k')\xi(t'') + i(E' - E_0)t' + i(k' - k_0)\xi(t')\right)$$

Argument der exp-Funktion stationär, wenn

$$\begin{aligned} (k' + v(t'))^2 &= (k_0 + v(t'))^2 \\ \int_{t'}^{t''} dt (k' + v(t)) &= 0 \\ (k + v(t''))^2 &= (k' + v(t''))^2 \end{aligned}$$

⇒ 2. Bornsche Näherung liefert richtige Cutoffs für zwei Stöße

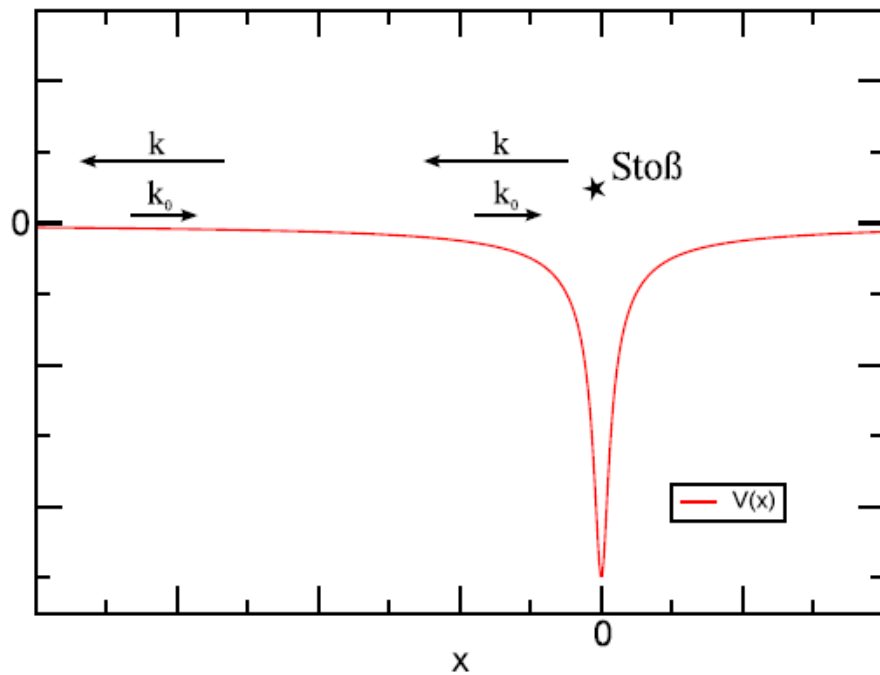
Aber: Absolute Photonen-Absorptionswahrscheinlichkeiten um viele Größenordnungen zu groß!

⇒ 2. Bornsche Näherung bringt keine Verbesserung

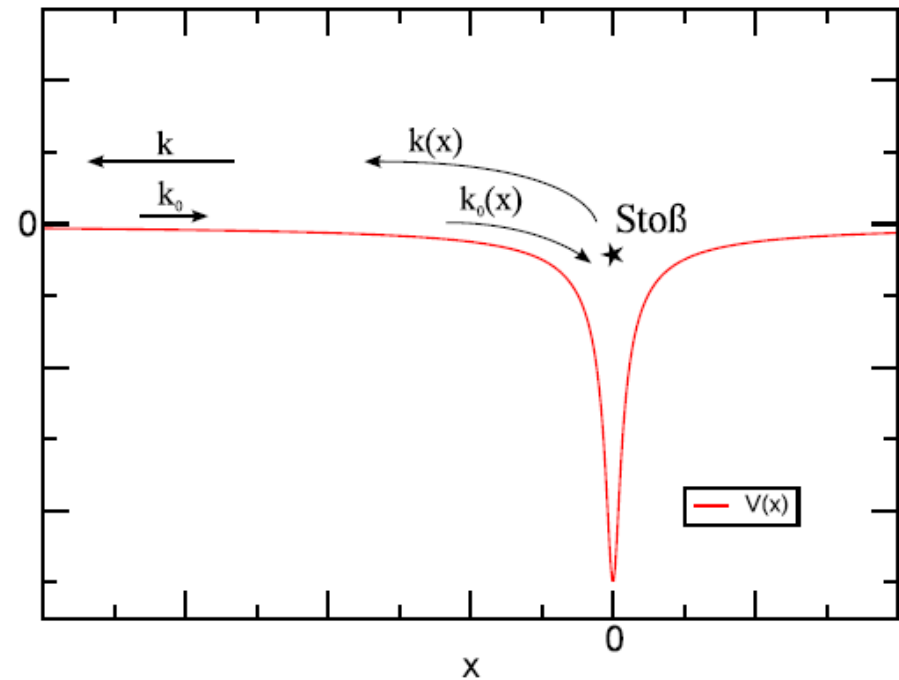
Beschleunigungseffekte bei der Potentialstreuung

Beschleunigungseffekte werden in der Bornschen Näherung vernachlässigt!

1. Bornsche Näherung



1. Bornsche Näherung mit Beschleunigungseffekten



1. Born-WKB-Näherung

Nehme WKB-Wellen anstelle von Volkov-Zuständen für die asymptotischen Zustände:

(Kramers-Henneberger-System)

Volkov-Zustand: $\langle x | k(t) \rangle = \exp \left(ikx - i \frac{k^2}{2} t \right)$

WKB-Welle: $\langle x | k^{WKB}(t) \rangle = \exp \left(i \int^x k(x') dx' - i \frac{k^2}{2} t \right)$

Ortsabhängiger Impuls: $\frac{k^2(x)}{2} + V(x) = \frac{k^2}{2}$

1. Born-WKB-Näherung

Nehme WKB-Wellen anstelle von Volkov-Zuständen für die asymptotischen Zustände:

(Kramers-Henneberger-System)

Volkov-Zustand: $\langle x|k(t)\rangle = \exp\left(ikx - i\frac{k^2}{2}t\right)$

WKB-Welle: $\langle x|k^{WKB}(t)\rangle = \exp\left(i\int^x k(x')dx' - i\frac{k^2}{2}t\right)$

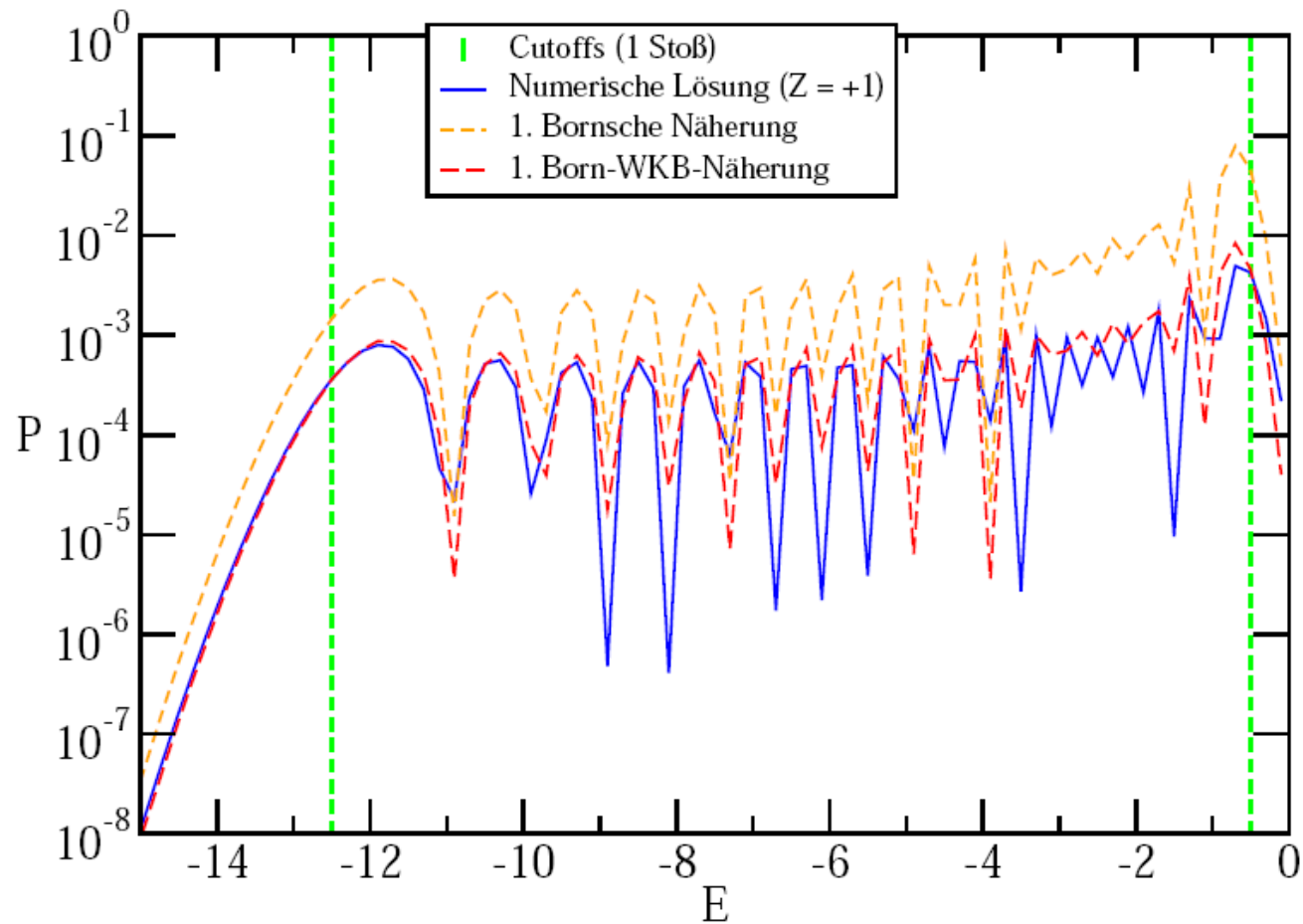
Ortsabhängiger Impuls: $\frac{k^2(x)}{2} + V(x) = \frac{k^2}{2}$

\implies **WKB-Korrektur im Matrixelement:**

$$\langle k|V(x)|k_0\rangle \longrightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} dx V(x) \exp\left(i\int^x k_0(x')dx' - i\int^x k(x')dx'\right)$$

Vergleich der 1. Born-WKB-Näherung mit numerischen Ergebnissen

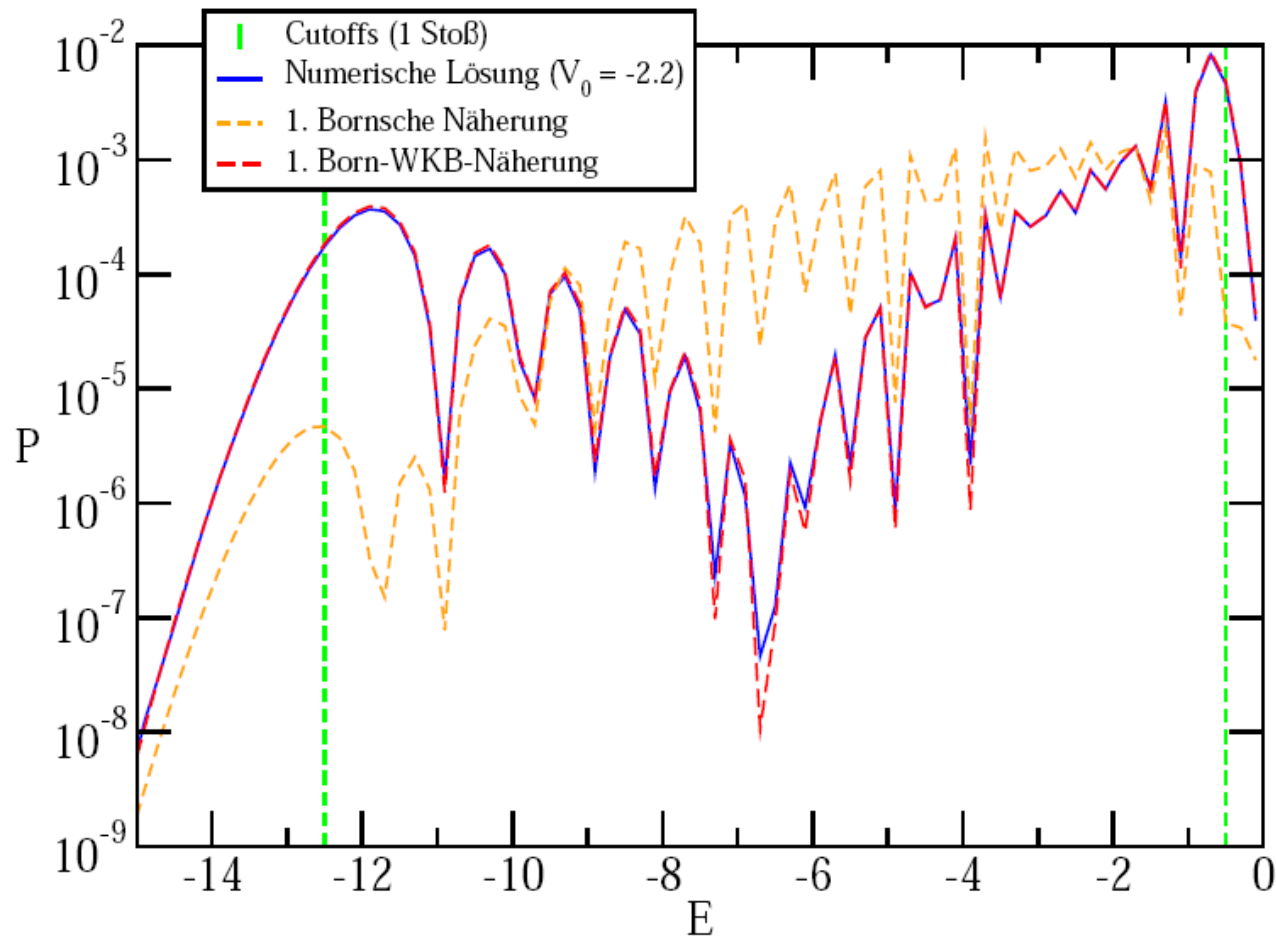
Energiespektrum nach der Streuung am Softcore-Coulomb-Potential



Parameter: $k_0 = 3$, $v_0 = 1$ ($\mathcal{E}_0 = \omega = 0.2$)

Vergleich der 1. Born-WKB-Näherung mit numerischen Ergebnissen

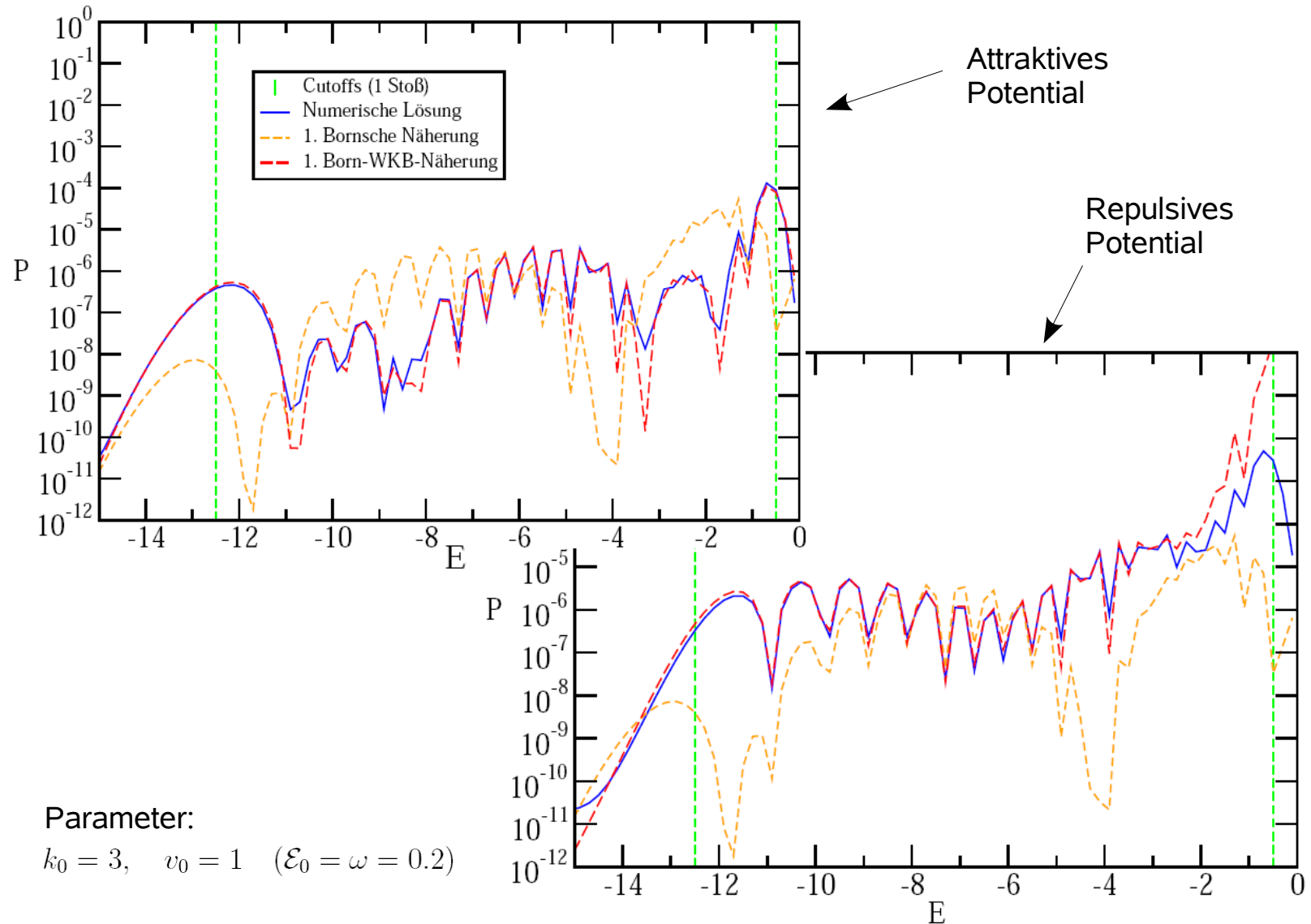
Energiespektrum nach der Streuung am Kastenpotential



Parameter: $k_0 = 3$, $v_0 = 1$ ($\mathcal{E}_0 = \omega = 0.2$)

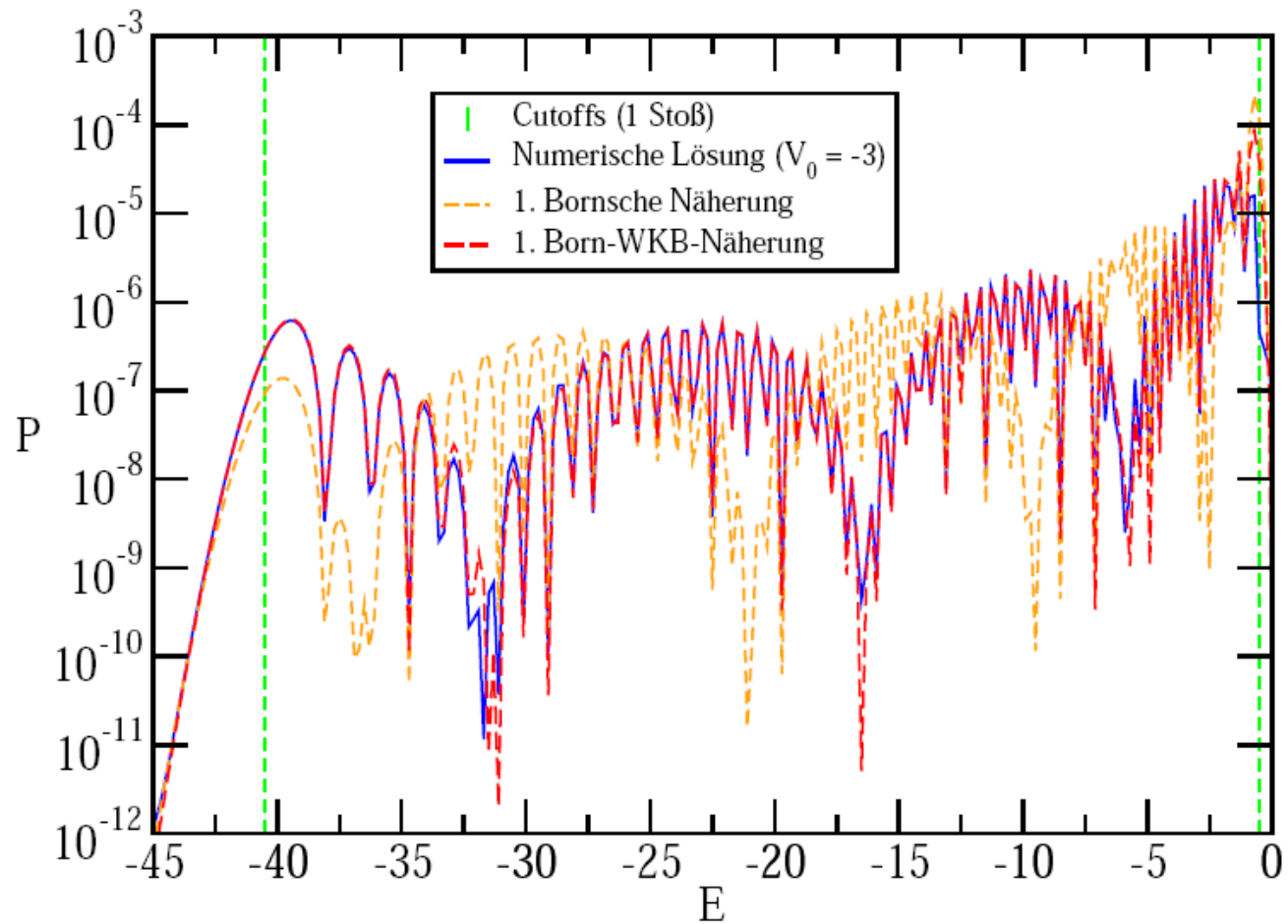
Vergleich der 1. Born-WKB-Näherung mit numerischen Ergebnissen

Energiespektrum nach der Streuung am Dreieckpotential



Vergleich der 1. Born-WKB-Näherung mit numerischen Ergebnissen

Energiespektrum nach der Streuung am Oszillatorpotential



Parameter: $k_0 = 5$, $v_0 = 2$ ($\mathcal{E}_0 = 0.4, \omega = 0.2$)

Zusammenfassung

- 1. Bornsche Näherung berücksichtigt maximal einen Stoß
- 2. Bornsche Näherung berücksichtigt maximal zwei Stöße
- Klassisches, instantanes Stoßmodell liefert Kriterium dafür, wann Stoßprozesse zweiter Ordnung verschwinden:

$$k_0 \gtrsim 2v_0$$

- 1. Bornsche Näherung liefert für die unendlich hohe Potentialstufe sehr gute Ergebnisse falls dieses Kriterium erfüllt ist
- 1. Bornsche Näherung liefert bei der Potentialstreuung falsche Interferenzstruktur und gleiche Ergebnisse für repulsives und attraktives Potential
- WKB-Korrektur berücksichtigt Beschleunigungseffekte des Potentials, so dass die 1. Born-WKB-Näherung bei der Potentialstreuung sehr gute Ergebnisse liefert, wenn das obige Kriterium erfüllt ist