

Wie kann man <sup>(numerisch)</sup>  $\rho(E)$  ausrechnen, ohne alle Eigenzustände  $|\psi_E\rangle$  explizit bestimmen zu müssen?

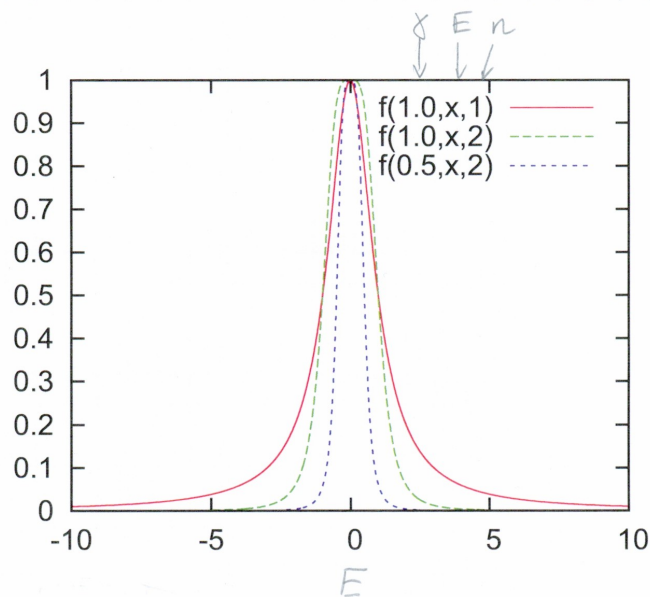
"Window operator" - Methode

Definiere "window operator"

$$W_{E;n} = \frac{\gamma^{2n}}{(H_0 - E)^{2n} + \gamma^{2n}}$$

Gauß-artiges Profil der "Ordnung"  $n$  und Breite  $\gamma$ .  
Je größer  $n$ , desto rechteckiger ist das Fenster.

Für  $H_0 = 0$  (zentriert um  $E = 0$ ):



windows.ps

Wendet man  $W_{E;n}$  auf  $|\psi(t_f)\rangle$  an, so werden die Energiekomponenten um  $E$  herausprojiziert:

$$|\chi_{E;n}\rangle = W_{E;n} |\psi(t_f)\rangle$$

Wir bilden nun den Erwartungswert

$$\begin{aligned} \langle \psi(t_f) | W_{Ejn}^2 | \psi(t_f) \rangle &= \langle \chi_{Ejn} | \chi_{Ejn} \rangle \\ &= \int_{E'} \int_{E''} a_{E'}^* \langle \psi_{E'} | \left( \frac{\gamma^{2n}}{(\mathbb{H}_0 - E)^{2n} + \gamma^{2n}} \right)^2 | \psi_{E''} \rangle a_{E''} dE' dE'' \\ &= \int_{E'} |a_{E'}|^2 \left( \frac{\gamma^{2n}}{(E' - E)^{2n} + \gamma^{2n}} \right)^2 dE' \end{aligned}$$

Für  $\gamma \rightarrow 0$  wird daraus  $\langle \chi_{E, \gamma \rightarrow 0, n} | \chi_{E, \gamma \rightarrow 0, n} \rangle \sim |a_E|^2 = P(E)$ , wie gewünscht.

Für endliche  $\gamma$  modelliert der „window operator“ eine endliche Energieauflösung wie im Experiment.

### Implementierung

Wir müssen  $|\chi_{Ejn}\rangle = \frac{\gamma^{2n}}{(\mathbb{H}_0 - E)^{2n} + \gamma^{2n}} |\psi(t_f)\rangle$

berechnen. Wieder haben wir einen Operator  $(\mathbb{H}_0)$  im Nenner. Daher:

$$[(\mathbb{H}_0 - E)^{2n} + \gamma^{2n}] |\chi_{Ejn}\rangle = \gamma^{2n} |\psi(t_f)\rangle$$

z.B. für  $n=1$

$$(\mathbb{H}_0 - E + i\gamma) \underbrace{(\mathbb{H}_0 - E - i\gamma)}_{|\chi'_{Ej1}\rangle} |\chi_{Ej1}\rangle = \gamma^2 |\psi(t_f)\rangle$$

Löse zunächst  $(\mathbb{H}_0 - E + i\gamma) |\chi'_{Ej1}\rangle = \gamma^2 |\psi(t_f)\rangle$  nach  $|\chi'_{Ej1}\rangle$  auf, so wie wir das im Propagationsalgorithmus auch machen konnten.

Anschließend  $(\mathbb{H}_0 - E - i\gamma) |\chi_{Ej1}\rangle = |\chi'_{Ej1}\rangle$

nach  $|X_{Ej1}\rangle$  auflösen und  
 $\langle X_{Ej1} | X_{Ej1} \rangle = P(E)$   
 berechnen — fertig.

Für höhere  $n$  gilt allgemein

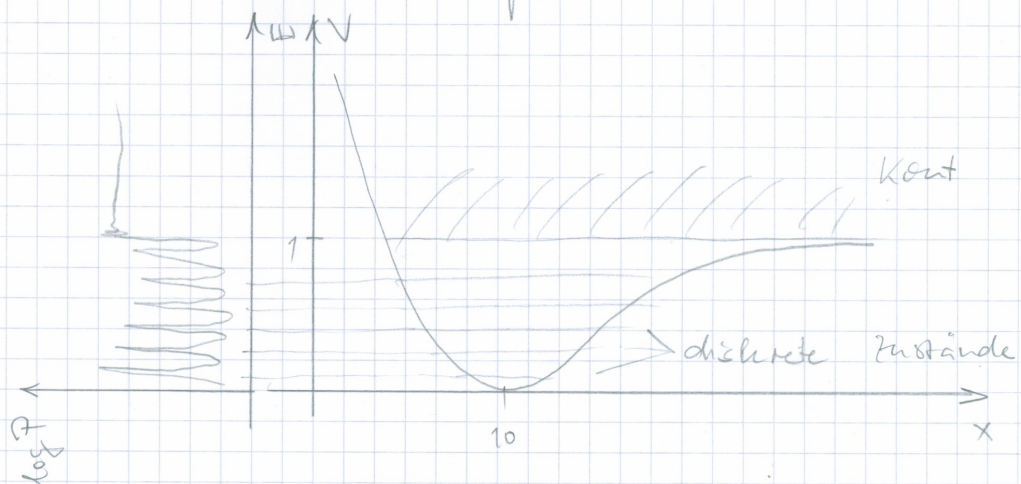
$$(H_0 - E)^{2^n} + \gamma^{2^n} = \prod_{k=1}^{2^{n-1}} (H_0 - E + \gamma e^{i\nu_{nk}})(H_0 - E - \gamma e^{i\nu_{nk}})$$

mit  $\nu_{nk} = \frac{(2k-1)\pi}{2^n}$ , so daß man den  
 obigen Schritt  $2^{n-1}$  mal ausführen muß.

Beispiele: 1. Wir wollen für das Morse-Potential  
 $V(x) = (1 - e^{-a(x-b)})^2$ ,  $a = \frac{1}{10}$ ,  $b = 10$   
 alle Energieeigenwerte ermitteln,  
 dazu initialisieren wir

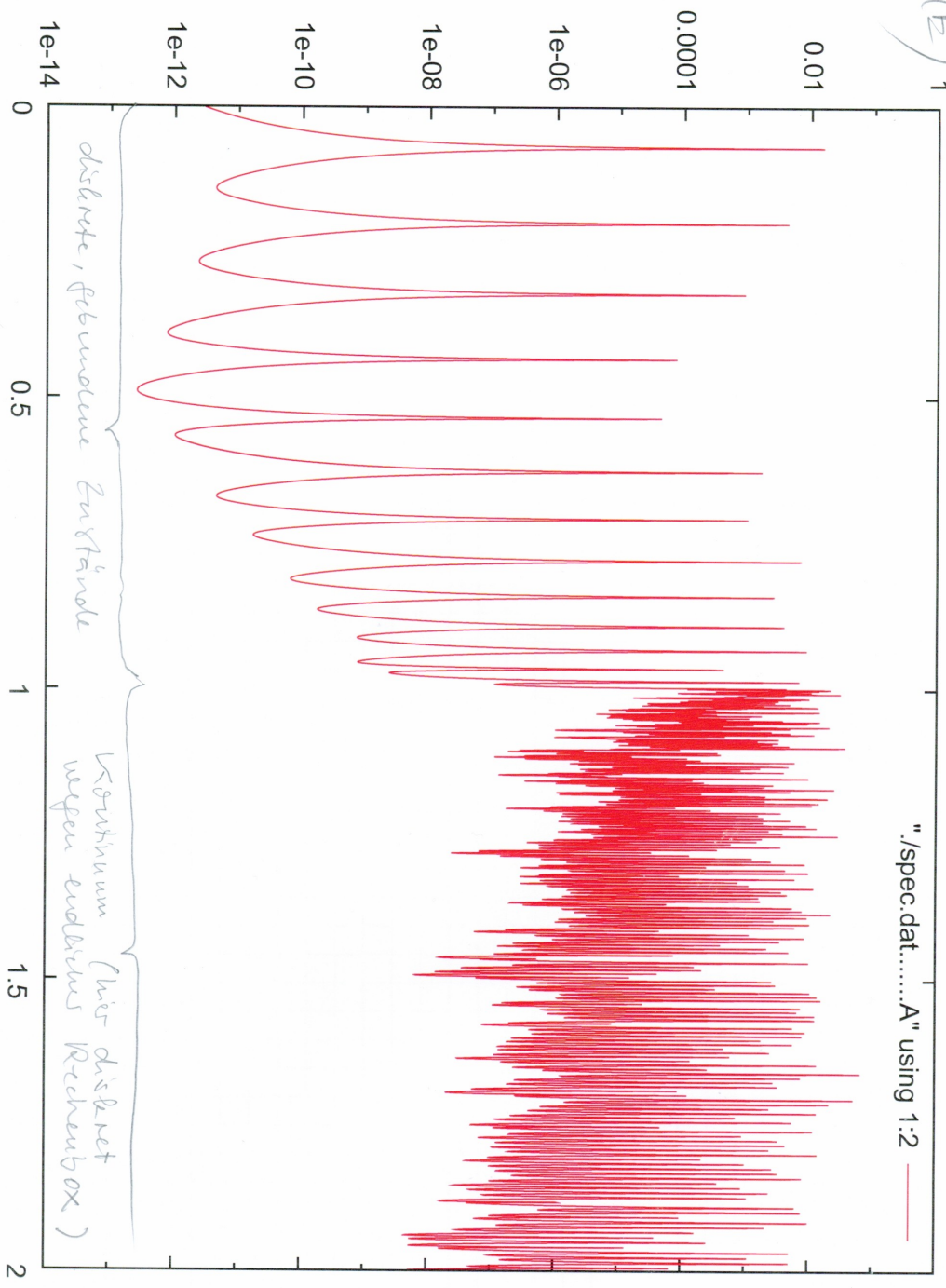
$$|\psi(t_f=0)\rangle$$

zufällig, so daß mit Sicherheit  
 alle Eigenzustände zum Spektrum  
 beitragen. Anschließend berechnen  
 wir mit der „window-operator“-  
 Methode das Spektrum



Körse - Potential, zufällig initialisierte Wellenfunktion

$\log P(E)$



diskrete, gebundene Zustände

Kontinuum (hier diskret wegen endlicher Rechenbox)

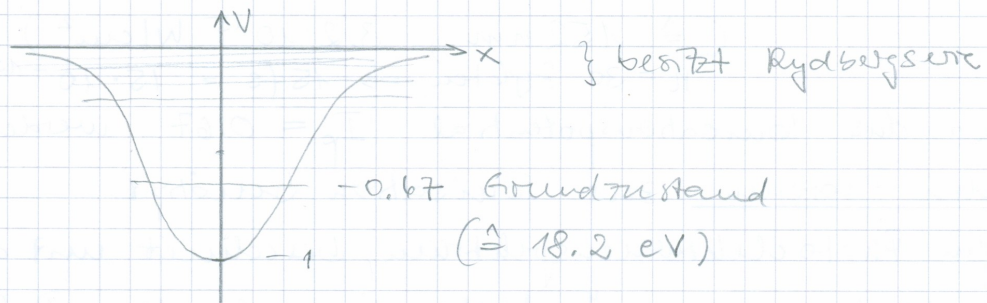
$E$

specautom.ps

## 2. „soft-core“-Potential

$$V(x) = -\frac{1}{\sqrt{x^2+1}}$$

modelliert ein „1D-Atom“:

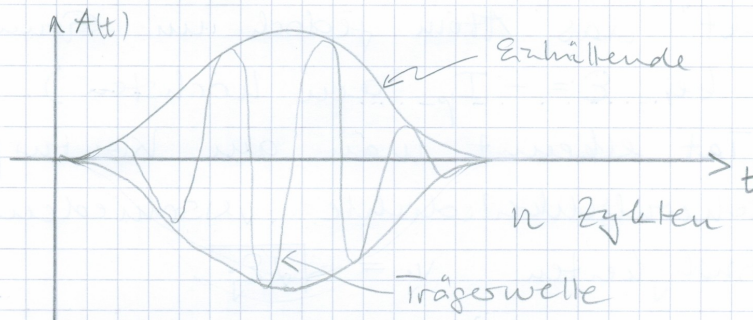


Wir legen nun an dieses Modellatom, präpariert im Grundzustand, ein Laserfeld mit dem Vektorpotential

$$A(t) = -\frac{\hat{E}}{\omega} \sin^2 \frac{\omega t}{2n} \cdot \sin \omega t$$

Pulsmitte

für  $0 \leq t \leq n \cdot \frac{2\pi}{\omega}$  und 0 sonst  
an:



$$\text{el. Feld } E(t) = -\partial_t A \approx \hat{E} \sin^2 \frac{\omega t}{2n} \cdot \cos \omega t$$

für  $n \gg 1$ .

Die zu lösende zeitabhängige Schrödingers-Gleichung

lautet

$$i\partial_t \psi(x,t) = \left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + E(t) \cdot x \right) \psi(x,t)$$

in Längenerichtung bzw

$$i\partial_t \psi(x,t) = \left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - iA(t) \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x,t)$$

in Geschwindigkeitsrichtung (wobei der Term  $\sim A^2(t)$  „wegtransformiert“ wurde).

- Betrachten wir zunächst

$$\omega = 0.3, \quad \hat{E} = 0.3 \quad (\text{atomare Einh.})$$

$$\left( \hat{\lambda} = 152 \text{ nm}, \quad 3.2 \cdot 10^{15} \text{ W/cm}^2 \right)$$

$$n = 30 \text{ Zyklen} \Rightarrow 15 \text{ fs} = 15 \cdot 10^{-15} \text{ s}$$

Da das Ionisationspotential  $I_p = 0.67$  werden drei Protonen zur Ionisation benötigt.

Im Photoelektronenspektrum, berechnet mit der „window-operator“-Methode nach dem Puls, erkennt man Peaks bei (verslg. Photoeffekt)

$$E_j = -I_p + j\omega \quad \text{für } j = 3, 4, 5, 6,$$

die jedoch exponentiell abfallen (Multiphotonionis.).

Außerdem sind angeregte Zustände ( $E < 0$ ) bevölkert werden. Am wahrscheinlichsten „überlebt“ das Atom jedoch im Grundzustand (Peak bei  $E = -I_p$  am höchsten).

In der Tat erkennt man am Konturplot der Wahrscheinlichkeitsdichte verschiedenen

Geschwindigkeiten  $v_j = \sqrt{2E_j}$ .

491... ps

- Betrachten wir nun  $\omega = 0.1, \quad \hat{E} = 0.08, \quad n = 10$ .

mindestens sieben Photonen sind zur Ionisation nötig. Das Spektrum ist äußerst komplex:

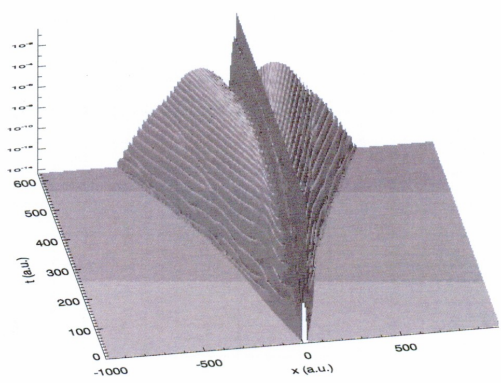
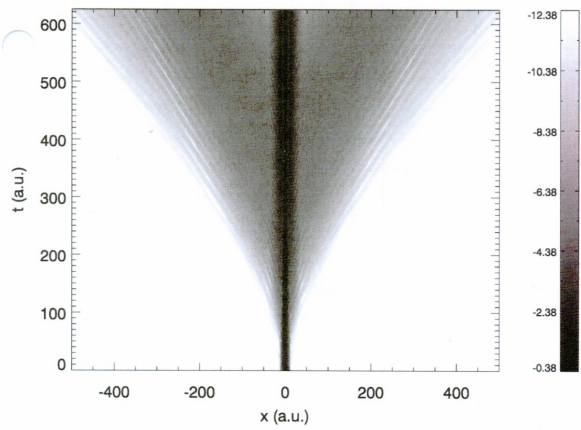
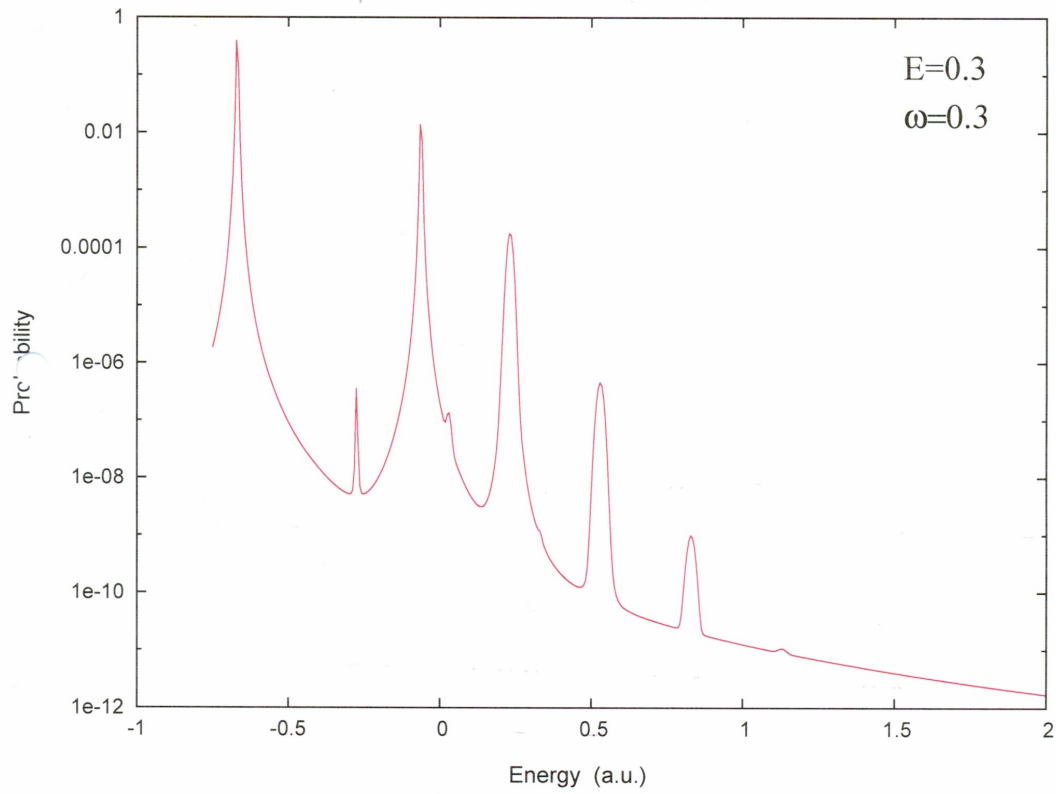
sehr viele Peaks:

← „cut-off“ des Spektrums

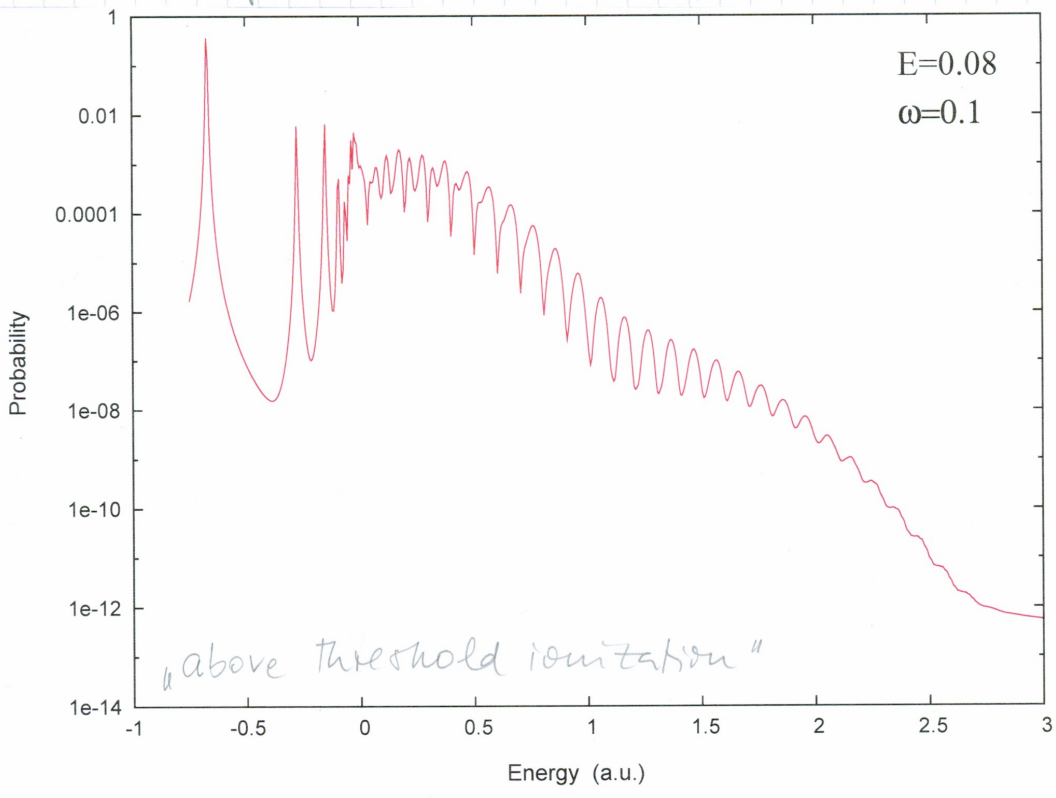
$$\frac{E_{\text{max}} + I_p}{\omega} \approx \frac{2.5 + 0.67}{0.1} \approx 32$$

$\Rightarrow$  mindestens 32 Photonen sind beteiligt

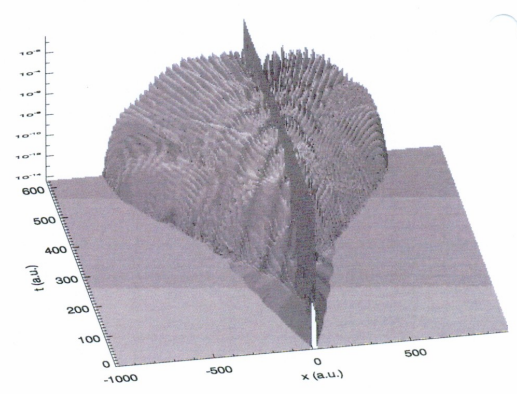
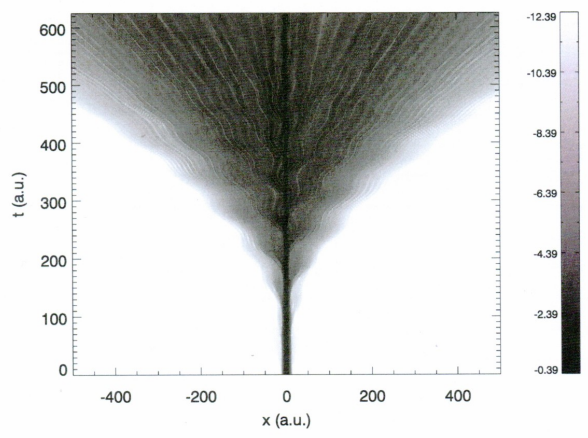
### Multiphoton ionisation



Angeregte Zustände bis zu die Kontinuum-  
leante sind nach der WW mit dem Laser  
puls besetzt.  
Kein exponentieller Abfall.



[ATI... ps]



Analysiert man genau die Lage der Peaks, so findet man, daß der vsallg. Photoeffekt

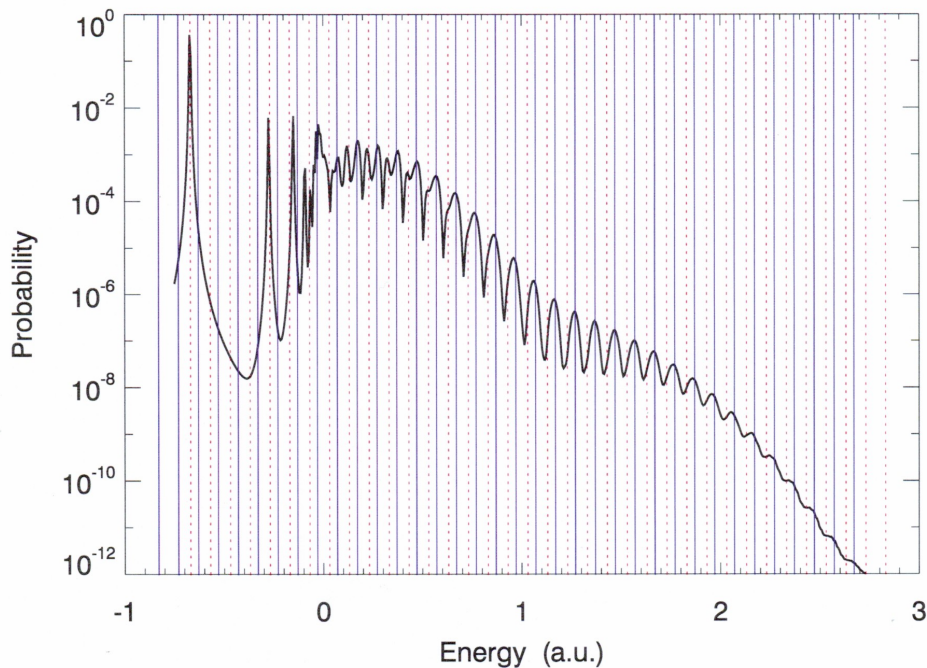
$$E_j = -I_p + j\omega, \quad j = 7, 8, 9, \dots$$

hier nicht anwendbar ist (rot gestrichelt in der Abb).  
Stattdessen gilt die Formel (blau durchgezogen)

$$E_j' = - \underbrace{(I_p + U_p)}_{I_p'} + j\omega, \quad j = 9, 10, \dots \quad (+)$$

wobei  $U_p = \frac{\hbar^2 E^2}{4m\omega^2}$  ( $\frac{e^2 \hbar^2 E^2}{4m\omega^2}$  in SI-Einheiten)

die seg. ponderomotorische Energie ist.



Woher kommt diese Verschiebung um  $U_p$ ? Wird auch  
experim.  
beobachtet!  
Wir werden in folgendem eine Herleitung  
durchführen, jedoch gibt es auch eine recht  
anschauliche Erklärung:

Kommt das Elektron in's Kontinuum, so muss es im Laserfeld schwappen:

$$m\dot{v} = -e\hat{E}\cos\omega t = e\partial_t A(t)$$

$$mv = -e\hat{E}\int^t \cos\omega t' dt'$$

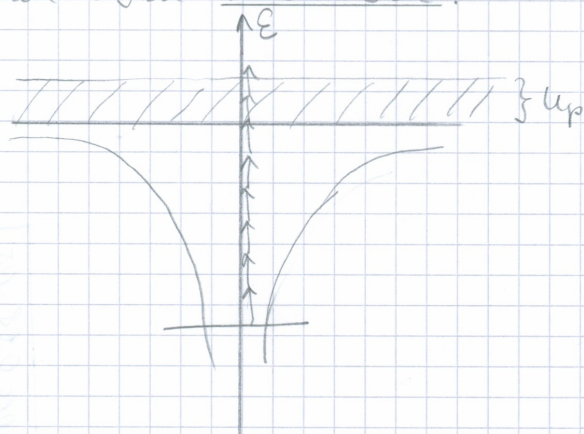
$$= -e\frac{\hat{E}}{\omega}\sin\omega t = eA(t)$$

$$E_{kin} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}\frac{e^2\hat{E}^2}{m\omega^2}\sin^2\omega t$$

Zeitlich gemittelte Oszillationsenergie

$$\overline{E_{kin}} = \frac{1}{2}\frac{e^2\hat{E}^2}{m\omega^2}\overline{\sin^2\omega t} = \frac{e^2\hat{E}^2}{4m\omega^2} = U_p$$

D.h. die Kontinuumskante ist effektiv um  $U_p$  nach oben verschoben:



Die Verschiebung von Energieniveaus durch ein Laserfeld wird AC-Stark-Effekt genannt.

Gebundene Zustände verschieben sich auch.

In der Tat ist die absolute Verschiebung eichabhängig, die relative Verschiebung zwischen Energieniveaus jedoch eichinvariant (dazu später mehr im Abschnitt „Floquet-Theorie“).

## Die Starkfeldnäherung ("strong field approximation")

Zunächst interessiert uns der Zustand nach dem Ionisationsschritt: wie lautet die Lösung der zeitabhängigen Schrödungs-Gl. für ein freies Elektron im Laserfeld?

Am einfachsten zu sehen in Geschwindigkeitsgleichung (atomare Einheiten):

$$i\partial_t |\psi(t)\rangle = \frac{[\vec{p} + \vec{A}(t)]^2}{2} |\psi(t)\rangle$$

Das Hamiltonian ist diagonal im Impulsraum.

Wir können daher die Lösung sofort hinschreiben:

$$|\psi_{\vec{p}}^{(v)}(t)\rangle = e^{-iS_{\vec{p}}(t)} |\vec{p}\rangle, \quad S_{\vec{p}}(t) = \frac{1}{2} \int_0^t [\vec{p} + \vec{A}(t')]^2 dt'$$

↑  
Gordon-Volkov  
- Zustand  
(1926, 1935)

↑  
Wirkung

Wir haben schon in der ersten Vorlesung gesehen, daß der Übergang zur Längengleichung einer Translation im Impulsraum entspricht.

$$\Rightarrow |\psi_{\vec{p}}^{(v)}(t)\rangle = e^{-iS_{\vec{p}}(t)} |\vec{p} + \vec{A}(t)\rangle$$

ist die Lösung von  $i\partial_t |\psi'(t)\rangle = \left( \frac{1}{2} p^2 + \vec{E}(t) \cdot \vec{r} \right) |\psi'(t)\rangle$ ,

$\vec{E}(t) = -\partial_t \vec{A}(t)$ ,  $S_{\vec{p}}(t)$  wie oben.

Wir wollen nun das Übergangsmatrixelement

$$M_{\vec{p}}(t) = \langle \psi_{\vec{p}} | U(t, t_i) | \psi_0 \rangle \quad (0)$$

berechnen.  $U(t, t_i)$  ist der Zeitentwicklungsoperator und erfüllt

$$i \frac{d}{dt} U(t, t') = H(t) U(t, t') \quad (1)$$

und mit  $H(t) = H_0 + W(t) = V + H_V(t)$

$$\begin{array}{ccc} \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \frac{\vec{p}^2}{2} + V & \vec{p} \cdot \vec{A} + \frac{A^2}{2} & \frac{(\vec{p} + \vec{A})^2}{2} \end{array}$$

können wir formal aus (1) eine Integralgleichung machen:

$$U(t, t') = U_0(t, t') - i \int_{t'}^t dt'' U(t, t'') W(t'') U_0(t'', t') \quad (1)$$

oder auch

$$U(t, t') = U_V(t, t') - i \int_{t'}^t dt'' U_V(t, t'') V U(t'', t'). \quad (2)$$

Wir setzen (1) in (0) ein und beachten, daß  $\langle \psi_{\vec{p}} | U_0(t, t_i) | \psi_0 \rangle = 0$ , da  $U_0(t, t_i) | \psi_0 \rangle = e^{-iE_0(t-t_i)} | \psi_0 \rangle$  und  $\langle \psi_{\vec{p}} | \psi_0 \rangle = 0$  (orthogonale Zustände)

$$\begin{aligned} \Rightarrow M_{\vec{p}}(t) &= -i \int_{t_i}^t dt' \langle \psi_{\vec{p}} | U(t, t') W(t') U_0(t', t_i) | \psi_0 \rangle \\ &= e^{-iE_0(t-t_i)} \langle \psi_{\vec{p}}(t') | W(t') | \psi_0 \rangle \end{aligned} \quad (3)$$

Nun setzen wir (2) in (3) ein:

$$M_{\vec{p}}(t) = -i \int_{t_i}^t dt' \langle \psi_{\vec{p}} | U_V(t, t') [ W(t') | \psi_0(t') \rangle - i \int_{t_i}^{t'} dt'' V U(t', t'') W(t'') | \psi_0(t'') \rangle ]$$

Localisation zur Zeit  $t'$   
 Localisation  
 Propagation im Lagesfeld  
 (würde man Wert  $\psi_0$  einsetzen  $\rightarrow$  übliche zeitlich. Störungsthe.)  
 Streuung  
 Propagation

Dieser Ausdruck ist noch immer exakt!

Nun kommt die SFA-Näherung: Wir lassen zunächst den zweiten Term (mit der WW mit  $V$ ) weg und ersetzen den exakten Endzustand durch eine ebene Welle;  $|\psi_{\vec{p}}\rangle \rightarrow |\vec{p}\rangle$ . Dadurch vernachlässigen wir Coulomb-Effekte im Endzustand (Streuphasen etc.), d.h. ab dem lokalisationszeitpunkt wird die Coulomb-WW vernachlässigt. Mit

$$U_V(t, t') = \int d^3k |\psi_{\vec{k}}^{(v)}(t)\rangle \langle \psi_{\vec{k}}^{(v)}(t')|$$

folgt (da  $|\psi_{\vec{k}}^{(v)}(t_f)\rangle \sim |\vec{k}\rangle$  für  $\vec{A}(t_f) = \vec{0}$ ) nach dem Puls

$$M_{\vec{p}}^{\text{SFA}}(t_f) = -i \int_{t_i}^{t_f} dt' \underbrace{\langle \vec{p} | \psi_{\vec{p}}^{(v)}(t_f) \rangle}_{e^{-iS_{\vec{p}}(t_f)}} \underbrace{\langle \psi_{\vec{p}}^{(v)}(t') | W(t') | \psi_0(t') \rangle}_{\langle \vec{p} | e^{iS_{\vec{p}}(t')} \rangle \text{ in Geschw.-Eichung}}$$

$\langle \vec{p} + \vec{A}(t') | e^{iS_{\vec{p}}(t')} \rangle$  in Längeneichung

$$= -i \int_{t_i}^{t_f} dt' e^{-iS_{\vec{p}}(t_f, t')} e^{-i\epsilon_0(t'-t_i)} \times \left\{ \begin{array}{l} \langle \vec{p} | \vec{p} \cdot \vec{A}(t') + \frac{1}{2} A^2(t') | \psi_0 \rangle \\ \langle \vec{p} + \vec{A}(t') | \vec{r} \cdot \vec{E}(t') | \psi_0 \rangle \end{array} \right\}$$

je nach Eichung  $=: f_{\psi_0}(\vec{p}, t')$

Wir können das Matrixelement mit einem konstanten Phasenfaktor  $e^{iS_{\vec{p}, \epsilon_0}(t_f, t_i)}$  multiplizieren und erhalten

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{\vec{p}}^{\text{SFA}}(t_f) &= -i \int_{t_i}^{t_f} dt' e^{iS_{\vec{p}, \epsilon_0}(t', t_i)} f_{\gamma_0}(\vec{p}, t') \\ \text{mit } S_{\vec{p}, \epsilon_0}(t', t_i) &= \int_{t_i}^{t'} dt'' \left\{ \frac{[\vec{p} + \vec{A}(t'')]^2}{2} - \epsilon_0 \right\} \end{aligned} \quad (+)$$

Es gibt nun verschiedene Möglichkeiten, das Integral in  $\tilde{M}_{\vec{p}}^{\text{SFA}}$  auszuwerten. Offenbar hat man es mit „e hoch  $\sin \omega t$ “ bzw. „e hoch  $\sin^2 \omega t$ “ zu tun, was sich in Summen über Bessel-Funktionen umschreiben läßt. Eine andere Möglichkeit bietet die Sattelpunktmethode, mit der wir uns später noch beschäftigen wollen. Hier sei nur angemerkt, daß man das Integral in (+) umschreibt in eine Summe über Sattelpunktzzeiten  $t_s$ , für die

$$\left. \frac{\partial S_{\vec{p}, \epsilon_0}}{\partial t'} \right|_{t'=t_s} = 0$$

gilt, also

$$\frac{1}{2} (\vec{p} + \vec{A}(t_s))^2 = \epsilon_0, \quad (0)$$

was nichts anderes als die Energieerhaltung zum Ionisationszeitpunkt ausdrückt. Da die rechte Seite in (0) kleiner als Null ist folgt, daß  $t_s$  imaginär sein muß (Teilchen umsp durch klassische verbotenem Bereiche).

2636-371 = 263639

Mit heutigen Computation kann man (+) auch einfach numerisch auswerten. In Längeneichung haben wir

$$\overset{\sim \text{SFA}}{U_p}(t_f) = -i \int_{t_i}^{t_f} dt' e^{iS_p, \epsilon_0(t', t_i)} \vec{E}(t') \cdot \langle \vec{p} + \vec{A}(t') | \vec{r} | \psi_0 \rangle$$

Wir berechnen uns den Formfaktor

$$\langle \vec{k} | \vec{r} | \psi_0 \rangle$$

für den H-Grundzustand ( $\epsilon_0 = -\frac{1}{2}$  a.u.)

$$\langle \vec{k} | \vec{r} | \psi_0 \rangle \overset{\text{a.u.}}{=} i \vec{\nabla}_{\vec{k}} \psi_0(\vec{k}) \overset{H(\epsilon_0)}{=} i \vec{\nabla}_{\vec{k}} F_0(k) \gamma_{00}$$

$$= i \vec{\nabla}_{\vec{k}} \underbrace{4 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{(k^2+1)^2}}_{F_0(k)} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{4\pi}}}_{\gamma_{00}}$$

$$= i \frac{2^{3/2}}{\pi} \vec{\nabla}_{\vec{k}} \frac{1}{(k^2+1)^2} = i \frac{2^{3/2}}{\pi} (-2) \frac{2\vec{k}}{(k^2+1)^3} \underbrace{\vec{\nabla}_{\vec{k}} k}_{\frac{\vec{k}}{k}} = \frac{\vec{k}}{k}$$

$$= -i \frac{2^{7/2}}{\pi} \frac{\vec{k}}{(k^2+1)^3} = \vec{g}_{H(\epsilon_0)}(\vec{k})$$

Allgemeines gilt für Anfangswave  $\epsilon_0 = -\frac{Z^2}{2a^2}$

$$\langle \vec{k} | \vec{r} | \psi_0 \rangle = -i \frac{2^{7/2}}{\pi} (2|\epsilon_0|)^{5/4} \frac{\vec{k}}{(k^2 + 2|\epsilon_0|)^3}$$

Ausgangspunkt  $P(\mathcal{E}) d\mathcal{E} d\Omega = |M_{\vec{p}}|^2 \underbrace{p^2 dp d\Omega}_{d^3p}$  36

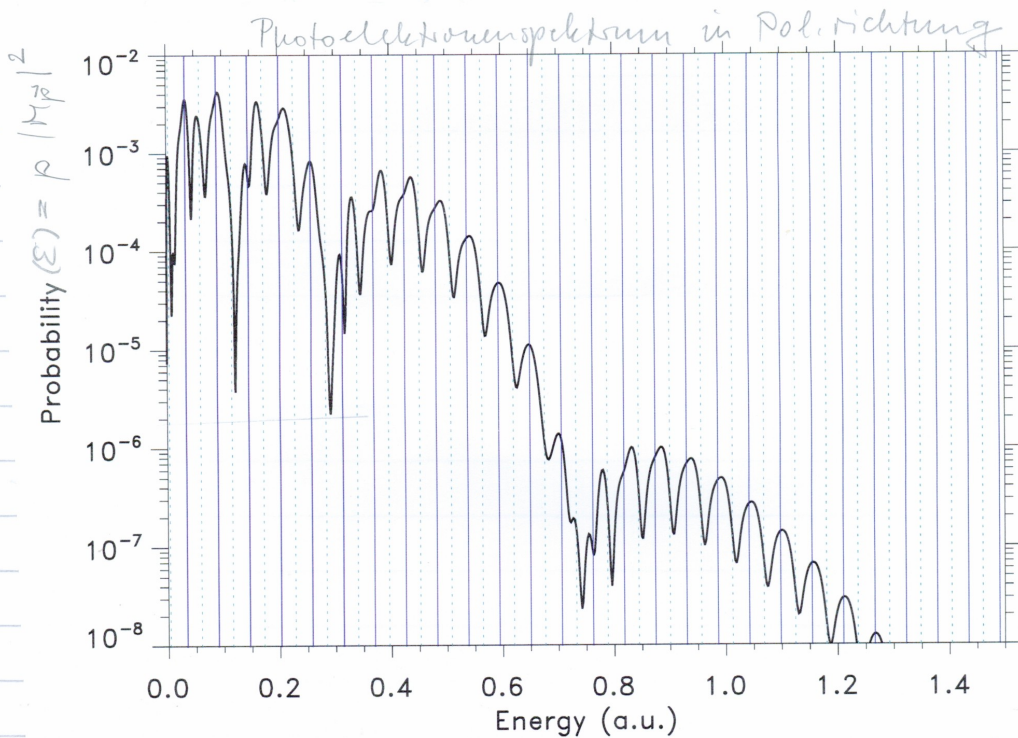
Wir berechnen nun also  $P(\mathcal{E}) = p |M_{\vec{p}}|^2$  mit

$$M_{\vec{p}}^{\text{SFA}} = -i \int_{t_i}^t dt' e^{iS_{p, \mathcal{E}_0}(t', t_i)} \vec{E}(t') \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}} \psi_{\vec{p}}(\vec{p} + \vec{A}(t')) \quad (17)$$

und nehmen wieder einen  $\sin^2$ -Puls an:

$$\vec{A}(t) = \hat{A} \vec{e}_z \sin^2\left(\frac{\omega t}{2n}\right) \sin \omega t \quad \text{für } 0 \leq t \leq n \cdot \frac{2\pi}{\omega}$$

für  $\omega = 0.056$  a.u. (800 nm),  $n = 10$ ,  $\hat{A} = -\frac{0.056}{\omega}$



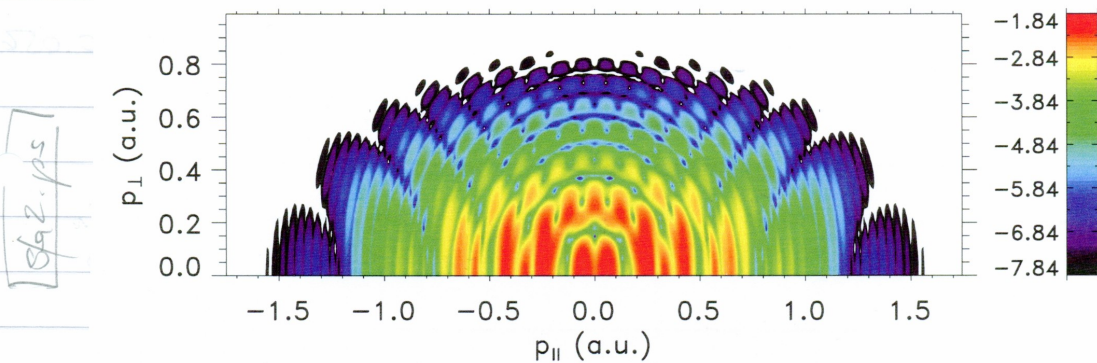
Die Abb. zeigt, dass die Peakpositionen bei

$$\mathcal{E}_j' = -(I_p + U_p) + j\omega$$

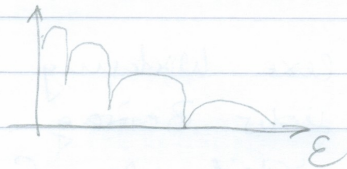
gut von der SFA reproduziert werden (dargest. blau).

$E_j = -I_p + j\omega$  liegt dazwischen (grün, gepunktet).

Der zweidimensionale Impulsplot zeigt ringartige Strukturen, die ebenfalls unterschiedlichen Photonenordnungen zugeschrieben werden können.



In Abb. \* beobachtet man neben den Peaks, die die unterschiedliche Anzahl der absorbieren Photonen reflektieren auch eine Struktur der Einhüllenden:



Diese Struktur lässt sich mittels Sattelpunktanalyse verstehen. Wir schreiben dazu das Integral (10) um als

$$M_{\vec{p}}^{\text{SFA}} \approx -2^{-1/2} \sum_s \frac{e^{iS_{\vec{p}}(t_s, t_i)}}{S_{\vec{p}} \epsilon_0(t_s, t_i)} \quad (*)$$

wobei  $S'' = \partial^2 S / \partial t^2$  und  $t_s$  sind die Lösungen von  $\frac{1}{2} (\vec{p} + \vec{A}(t_s))^2 = \epsilon_0$ ,

d.h. für  $\vec{A}(t) = A(t) \vec{e}_z$

$$A(t_s) = -p_{||} \pm i \sqrt{2|\epsilon_0| + p_{\perp}^2} \quad (\diamond)$$

$\uparrow$   
 $\vec{p} \cdot \vec{e}_z$

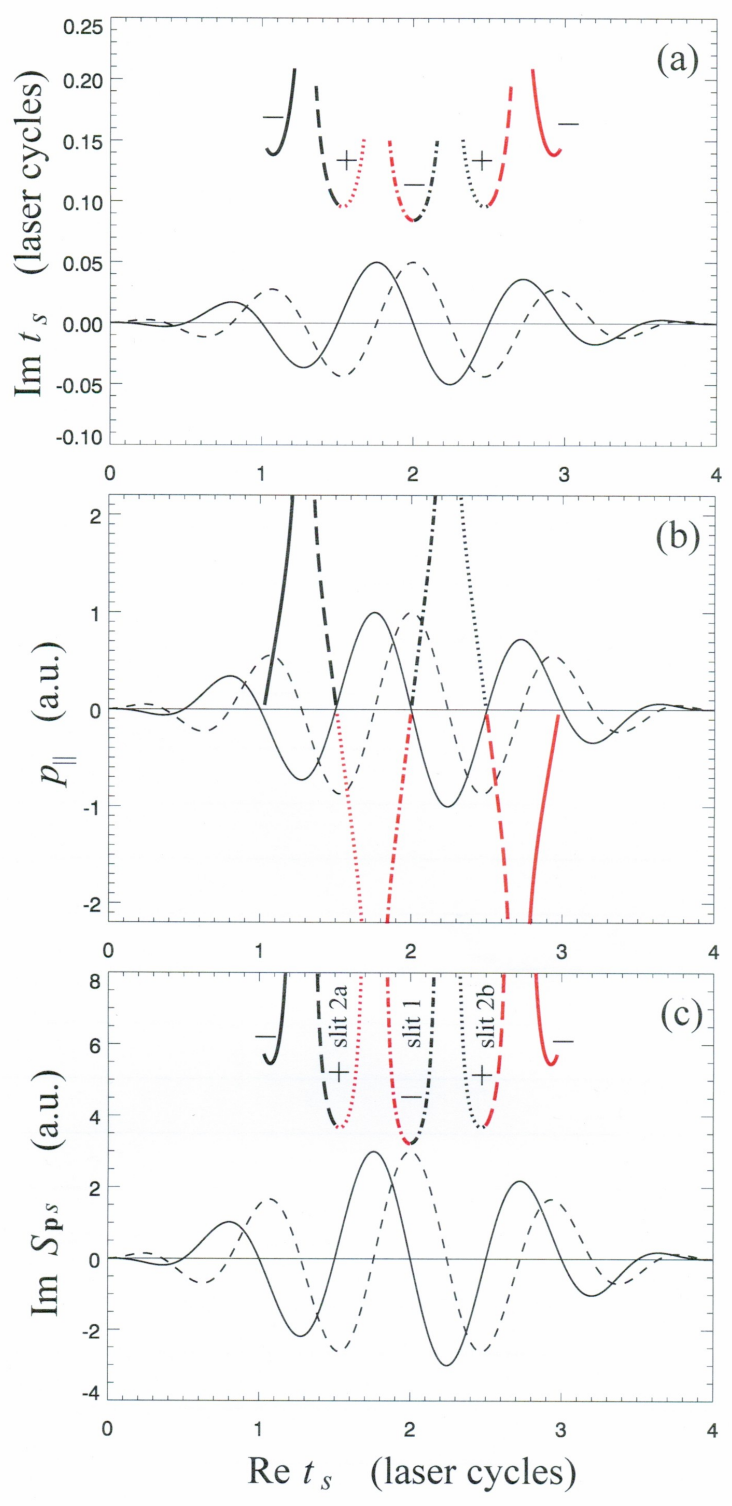
$\uparrow$   
 $\vec{p} - p_{||} \vec{e}_z$

Die Abb. auf S. 39 zeigt für  $n=4$  Zyklen,  $\omega=0.056$  und  $\hat{E} = -\omega \hat{A} = 0.1$  in (a) die komplexen Sattelpunktlösungen  $t_s$  für alle möglichen  $p_{||}$  ( $\vec{p}_{\perp} = \vec{0}$ ). Die Vorzeichen beziehen sich auf die Vorzeichen in  $(\diamond)$ , die Farben bedeuten  $p_{||} > 0$  (schwarz),  $p_{||} < 0$  (rot).

In (b) sieht man, dass es für einen vorgegebenen  $p_{||}$  vier verschiedene Ionisationswahrscheinlichkeiten  $t_s$  beitragen. Diese vier Beiträge in der Summe  $(\times)$  können interferieren („interference in time“, „slits in time“).

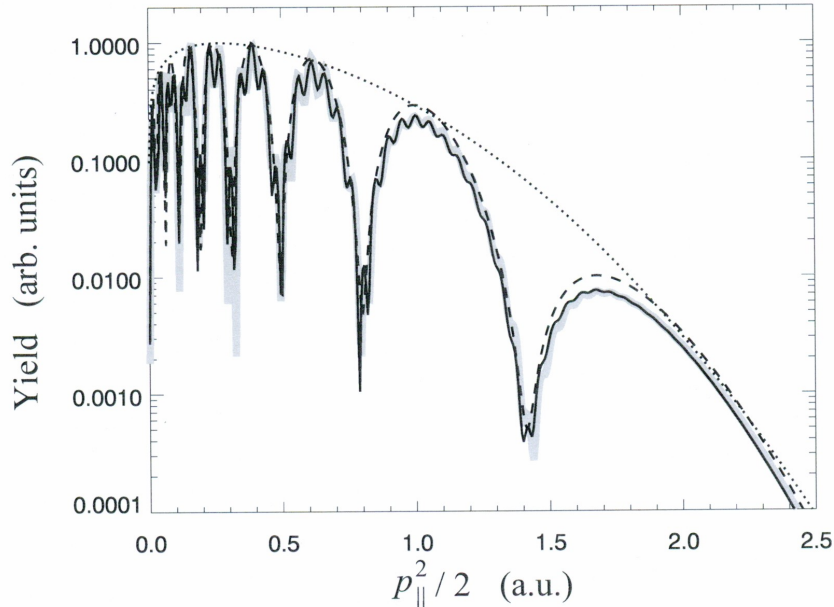
In (c) ist die komplexe Wirkung  $S_{\vec{p}, \epsilon_0}(t_s)$  selbst dargestellt. Je fider Beitrag  $\sim e^{i S_{\vec{p}, \epsilon_0}(t_s)}$ , bestimmt der Imaginärteil von  $S_{\vec{p}, \epsilon_0}$  das „Gewicht“ der Sattelpunktlösung (je größer  $\text{Im } S_{\vec{p}, \epsilon_0}(t_s)$ , desto kleiner das Gewicht).

Wenn man nun in  $(\times)$  nur den Beitrag mit der größten Wirkung  $\text{Im } S_{\vec{p}, \epsilon_0}(t_s)$  berücksichtigt, gibt es keine Interferenzeffekte im Spektrum.



saddle point analysis of 1. cpts

Dies entspricht der gepunkteten Linie in der folgenden Abbildung.



Nimmt man die zwei „wichtigsten“ Lösungen, erhält man die grobe Interferenzstruktur (gestrichelt). Die drei wichtigsten ergeben eine zusätzliche Modulation (durchgezogen), die schon fast exakt dem exakten Ergebnis (grau, aus numerischer Integration von  $(\square)$ ) entspricht.

### Interpretation als „Quantenbahnen“

Man betrachte die Bewegungsgleichung im Komplexen

$$\dot{\vec{v}} = -\vec{E}(t)$$

$$\dot{\vec{r}} = \vec{v}$$

(+)

für  $\text{Re } t > \text{Re } t_s$  und  $\frac{1}{2} v^2(t_s) = \epsilon_0$ .

Die Anfangsbedingung für den komplexen Ort wählen wir

$$\vec{r}(t_s) = \vec{r}_0. \quad (\#)$$

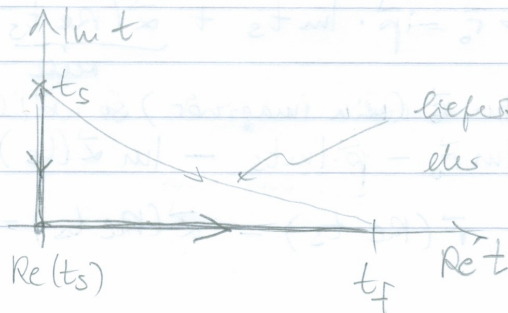
Die Sattelpunktsurteilung in a) schreiben wir

$$S_{\vec{p}, \epsilon_0}(t_s, t_i) = S_{\vec{p}, \epsilon_0}(t_f, t_i) - S_{\vec{p}, \epsilon_0}(t_f, t_s).$$

Das erste Term ist die gleiche für ein vorgegebenem Impuls  $\vec{p}$ . Das zweite Term ist die Wirkung entlang des Trajektores zwischen Losgabenszeit  $t_s$  und Pulsende  $t_f$

$$S_{\vec{p}, \epsilon_0}(t_f, t_s) = \int_{\substack{\text{Re } t_s, 0 \\ \text{Re } t_s, \text{Im } t_s}}^{\substack{\text{Re } t_s, 0 \\ t_f, 0}} d\tau \left[ \frac{1}{2} (\vec{p} + \vec{A}(\tau))^2 - \epsilon_0 \right]$$

In dieser Parametrisierung gehen wir erst entlang der imaginären Zeitachse von  $\text{Im } t_s$  bis 0 und dann von  $\text{Re } t_s$  bis zur (reellen) Endzeit  $t_f$  entlang der reellen Achse.



Wie verhalten sich Ort u. Geschwindigkeit  
in Komplexen?

Zunächst schreiben wir (\*) um in  $(\vec{v} = \vec{p} + \vec{A})$

$$\dot{\vec{p}} = 0, \quad \dot{\vec{r}} = \vec{p} + \vec{A}(t) \quad (\#)$$

Die Anfangsbed. lautet dann  $\frac{1}{2}(\vec{p} + \vec{A}(t_s))^2 = \epsilon_0$ .  
Der harmonische Impuls  $\vec{p}$  ist eine konstante d.h.  
Bewegung

$$\vec{p} = \text{const.} = \text{reell}$$

und für den Ort bekommen wir

$$\vec{r}(t) = \vec{r}_0 + \vec{p}(t - t_s) + \underbrace{\int_{t_s}^t \vec{A}(t') dt'}_{\vec{x}(t) - \vec{x}(t_s)}$$

wobei  $\vec{x}(t) = \int_{t_i}^t \vec{A}(t') dt'$ .

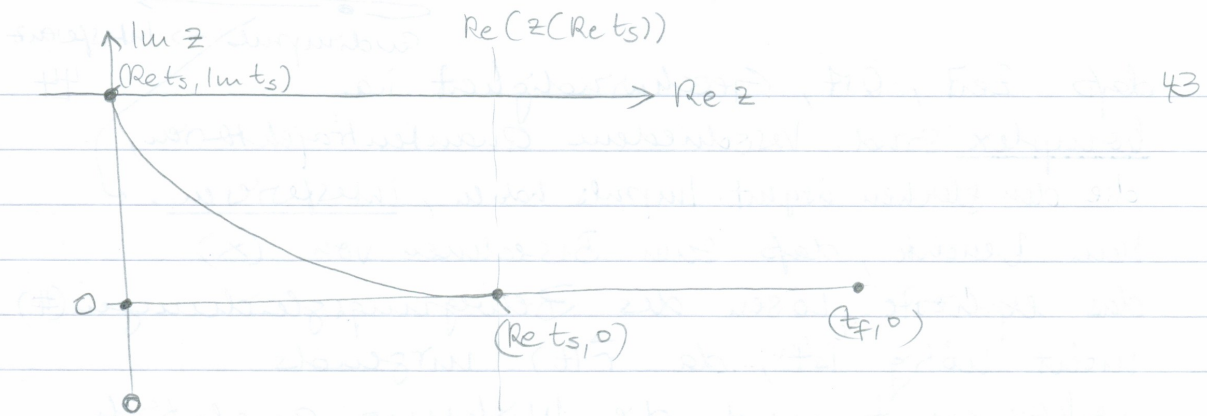
Da  $\vec{r}(t_s) = \vec{r}_0 \Rightarrow \vec{r}_0 = 0$  wegen (\*).

$$\begin{aligned} \text{Nun gilt } \vec{r}(\text{Re } t_s) &= \vec{r}_0 + \vec{p}(\text{Re } t_s - t_s) + \vec{x}(\text{Re } t_s) - \vec{x}(t_s) \\ &= \vec{r}_0 - i\vec{p} \cdot \text{Im } t_s + \underbrace{\vec{x}(\text{Re } t_s)}_{\text{reell}} - \vec{x}(t_s). \end{aligned}$$

Wir können nun  $\vec{r}_0 = i \text{Im } \vec{r}_0$  (rein imaginär) so wählen, dass

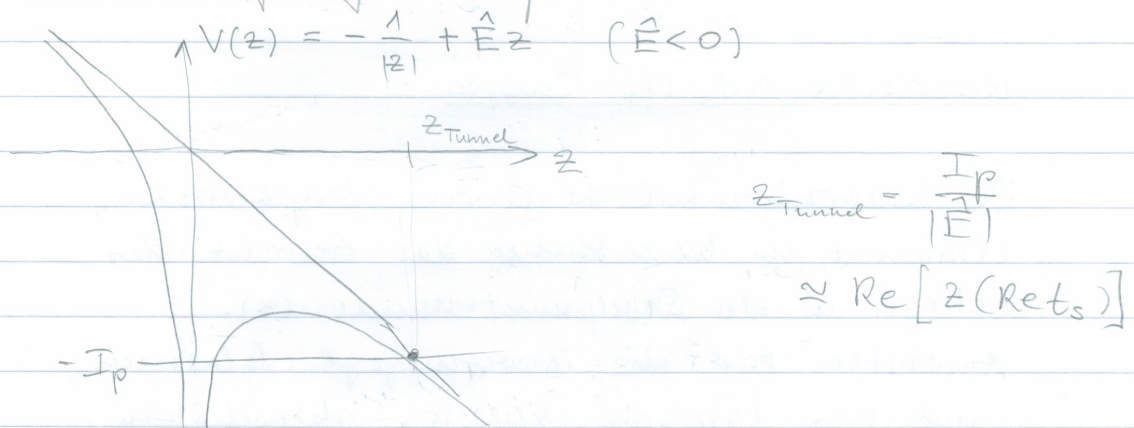
$$\text{Im } \vec{r}(\text{Re } t_s) = \text{Im } \vec{r}_0 - \vec{p} \cdot \text{Im } t_s - \text{Im } \vec{x}(t_s) = 0$$

$$\Rightarrow \text{Re } \vec{r}(\text{Re } t_s) = \vec{r}(\text{Re } t_s) = \vec{x}(\text{Re } t_s) - \text{Re } \vec{x}(t_s)$$



Für reelle Zeiten ist  $\vec{v}$  reell, denn  $\vec{p}$  ist reell und  $\vec{A}(t)$  auch für  $t \in \mathbb{R}$ . D.h. im klassisch erlaubten Bereich sind alle Größen reell.

$\text{Re}[\vec{v}(Re t_s)]$  lässt sich im quasistatischen Fall als „Tunnelausgang“ interpretieren



Man kann also jede einzelne Sattelpunktlösung als eine Trajektorie interpretieren, die zur Zeit  $t_s$  startet und die Anfangsbedingung

$$\frac{1}{2} (\vec{p} + \vec{A}(t_s))^2 = E_0 = -I_p$$

erfüllt. Das asymptotische Impuls am Defektor ist  $\vec{p}$  und nichtklassisches Dynamik (tunneln) wird dadurch Rechnung getragen,

2 Bahnen mit  $\vec{p}$  und  $\vec{p} + \vec{p}$

Endimpuls  $\rightarrow$  Interferenz

44

dass Zeit, Ort, Geschwindigkeit i.a. komplex sind. Verschiedene Quantenbahnen, die den gleichen asympt. Impuls haben, interferieren.

Man beachte, dass zum Berechnen von  $\langle x \rangle$  das explizite Lösen der Bewegungsgleichungen (#) nicht nötig ist, da  $\vec{r}(t)$  nirgends vorkommt und die Wirkung analytisch berechnet werden kann. Die Quantenbahnenmethode bietet jedoch die Möglichkeit, Coulomb-Korrekturen an der SFA vorzunehmen. Dazu (vielleicht) später mehr.

### Klassische out-off-Energie

Der Imaginäranteil der Quantenbahnen bestimmt im Wesentlichen das Gewicht des Beitrags in der Sattelsumme  $\langle x \rangle$ .

Antworten sind die Bewegungsgl. klassisch, und um typische Energien abzuschätzen, muss man lediglich die klassischen Bahnen von zur Zeit  $\text{Re } t_0$  freigesetzten Elektronen betrachten:

$$v(t > t_0) = - \int_{t_0}^t E(t') dt' , \quad t_0 = \text{Re } t_s$$
$$= A(t) - A(t_0)$$

Am Pulsende:  $v(t_f) = -A(t_0)$

(vgl. Abb. (b) auf S. 39: höhere  $p_{||} = v(t_f)$  quantenmechanisch dort möglich wo  $|A|$  maximal,  $|E|$  klein (allerdings mit kleinem Gewicht,