

da Ionisation unwahrscheinlich, wenn  $|E|$  klein).

Man erwartet also klassisch eine maximale Photoelektronenenergie

$$v_{\max} = \hat{A}$$

$$\text{Sodaf} \quad E_{\max} = \frac{1}{2} v_{\max}^2 = \frac{\hat{A}^2}{2} = \underline{2U_p}$$

In der Tat fällt bei dieser Energie die Wahrsch. in den Photoelektronenspektren deutlich ab.

### Rückstreuung

Wir kehren nun zum 2. Term im Matrixelement auf Seite 33 zurück:

$$M_{\vec{p}_2}^{\vec{p}_1}(t_f) = - \int_{t_i}^{t_f} dt' \int_{t_i}^{t'} dt'' \langle \psi_{\vec{p}_2} | U_V(t_f, t') V U(t', t'') W(t'') | \psi_0(t'') \rangle$$

↑ Steuerung  
↑ Prop   ↑ Prop.   ↑ Ionis.

Wie beim 1. Term ersetzen wir  $|\psi_{\vec{p}_2}\rangle$  durch  $|\vec{p}\rangle$ .  
 Jarub'shinaus ersetzen wir den vollen Propagator durch  $U_V(t', t'')$ .

$$\Rightarrow M_{\vec{p}_2}^{\vec{p}_1, \text{SFA}}(t_f) = - \int_{t_i}^{t_f} dt' \int_{t_i}^{t'} dt'' \langle \vec{p} | \psi_{\vec{p}_2}^{(V)}(t_f) \rangle \langle \psi_{\vec{p}_2}^{(V)}(t') | V$$

$$\times \int d^3k \langle \psi_{\vec{k}}^{(V)}(t') \rangle \langle \psi_{\vec{k}}^{(V)}(t'') | W(t'') | \psi_0(t'') \rangle$$

In Längenerweiterung haben wir somit

$$M_{\vec{p},2}^{SFA} = - \int_{t_i}^{t_f} dt' \int_{t_i}^{t'} dt'' e^{-iS_{\vec{p}}(t_f, t')} e^{iS_{\vec{p}}(t', t'')} \langle \vec{p} + \vec{A}(t') | V \rangle$$

$$\times \int d^3k | \vec{k} + \vec{A}(t') \rangle e^{-iS_{\vec{k}}(t')} e^{iS_{\vec{k}}(t'')} \times \langle \vec{k} + \vec{A}(t'') | \vec{r} \cdot \vec{E}(t'') | \psi_0 \rangle e^{-i\epsilon_0(t'' - t_i)}$$

Das Integral über  $k$  berechnen wir mit der Sattelpunktmethode (ein fünffaches Integral ist zu aufwendig für eine direkte numerische Integration)

$$e^{-iS_{\vec{k}}(t')} e^{iS_{\vec{k}}(t'')} = e^{-iS_{\vec{k}}(t', t'')}$$

$$S_{\vec{k}}(t', t'') = \int_{t''}^{t'} dt \frac{(\vec{k} + \vec{A}(t))^2}{2}$$

$$\vec{\nabla}_{\vec{k}} S_{\vec{k}}(t', t'') \Big|_{\vec{k}_s} = \int_{t''}^{t'} dt (\vec{k}_s + \vec{A}(t)) \stackrel{!}{=} \vec{0}$$

$$\vec{k}_s(t' - t'') = -(\vec{A}(t') - \vec{A}(t''))$$

$$\vec{k}_s = - \frac{\vec{A}(t') - \vec{A}(t'')}{t' - t''} \leftarrow \text{Selektiert diejenigen Paare } (t', t''), \text{ für die das Elektron zurückkommt.}$$

$\partial_{k_x} \partial_{k_y} \partial_{k_z} S_{\vec{k}} = t' - t''$  für alle  $i = 1, 2, 3$

$$\Rightarrow M_{\vec{p},2}^{SFA} = - \int_{t_i}^{t_f} dt' \int_{t_i}^{t'} dt'' e^{-iS_{\vec{p}}(t_f, t')} \langle \vec{p} + \vec{A}(t') | V | \vec{k}_s(t', t'') + \vec{A}(t') \rangle$$

$$\times \left( \frac{2\pi}{i(t' - t'')} \right)^{3/2} e^{-iS_{\vec{k}_s}(t', t'')} \times \langle \vec{k}_s(t', t'') + \vec{A}(t'') | \vec{r} \cdot \vec{E}(t'') | \psi_0 \rangle e^{-i\epsilon_0(t'' - t_i)}$$

von Sattelpunkt-Integration

$\left( \frac{2\pi}{iS''} \right)^{1/2} d\epsilon$  für  $dk_x, dk_y, dk_z$

Wir schreiben die Zeitintegrationen wie folgt um:

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_f} dt' \int_{t_i}^{t'} dt'' &= \int_{t_i}^{t_f} dt' \int_{t_i}^{t_f} dt'' \Theta(t' - t'') \\ &= \int_{t_i}^{t_f} dt'' \int_{t_i}^{t_f} dt' \Theta(t' - t'') \\ &= \int_{t_i}^{t_f} dt'' \int_{t''}^{t_f} dt' \end{aligned}$$

Das macht Sinn, denn Rückstreuung ( $t'$ ) kann nur nach der Ionisation ( $t''$ ) stattfinden.

Wir führen nun noch die "travel time"  $\tau = t' - t''$  ein und schreiben  $t = t' \Rightarrow t'' = t - \tau$  und setzen  $t_i = 0$

$$\begin{aligned} \Rightarrow M_{\vec{p},2}^{\text{SFA}} &= - \int_0^{t_f} dt e^{-iS_{\vec{p}}(t_f, t)} \int_0^t d\tau e^{-iS_{\vec{k}_s}(t, t-\tau)} \left(\frac{2\pi}{i\tau}\right)^{3/2} \\ &\quad \times e^{-i\epsilon_0(t-\tau)} \\ &\quad \times \langle \vec{p} + \vec{A}(t) | V | \vec{k}_s(t, t-\tau) + \vec{A}(t) \rangle \\ &\quad \times \langle \vec{k}_s(t, t-\tau) + \vec{A}(t-\tau) | \vec{v} \cdot \vec{E}(t-\tau) \rangle \\ &\quad \times |\gamma_0\rangle \quad \vec{E} \cdot \vec{g} \end{aligned}$$

Wir multiplizieren mit  $e^{iS_{\vec{p}}(t_f, 0)}$  und erhalten

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{\vec{p},2}^{\text{SFA}} &= - \int_0^{t_f} dt e^{iS_{\vec{p},\epsilon_0}(t, 0)} \int_0^t d\tau \left(\frac{2\pi}{i\tau}\right)^{3/2} e^{-iS_{\vec{k}_s, \epsilon_0}(t, t-\tau)} V_{\vec{p} - \vec{k}_s} \\ &\quad \times \vec{E}(t-\tau) \cdot \vec{g} (\vec{k}_s + \vec{A}(t-\tau)) \end{aligned} \quad (8)$$

mit  $\vec{g}$  analog zu dem "direkten" Matrixelement (8).

Das „frei-frei“-Matrixelement  $V_{\vec{p}-\vec{k}}$  ist z.B. für

$$V(r) = -\left(b + \frac{a}{r}\right) e^{-\lambda r}$$

$$\Rightarrow V_{\vec{p}-\vec{k}} = -\frac{2b\lambda + aC}{2\pi^2 C^2}, \quad C = (\vec{p}-\vec{k})^2 + \lambda^2$$

Für ein reines Coulomb-Potential ( $\lambda=0$ , keine Abschirmung) funktioniert diese Art der Sattelpunktrechnung nicht, denn für  $\lambda=0$  divergiert der Ausdruck.

Man kann nun in (8) die Sattelpunktmethode auch auf die Zeitintegration anwenden,

was wieder die Möglichkeit einer Interpretation mit Quantentrajektorien eröffnet (s.u.).

Man kann (8) auch numerisch integrieren.

Die Sattelpunktlsg. repräsentieren die wichtigsten zu den zwei Zeiten  $t$  und  $t-Y$ .

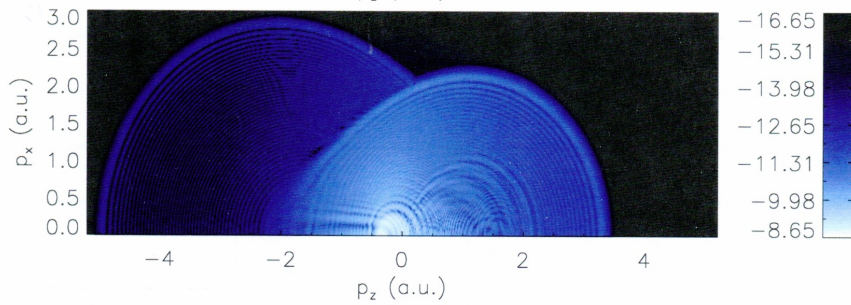
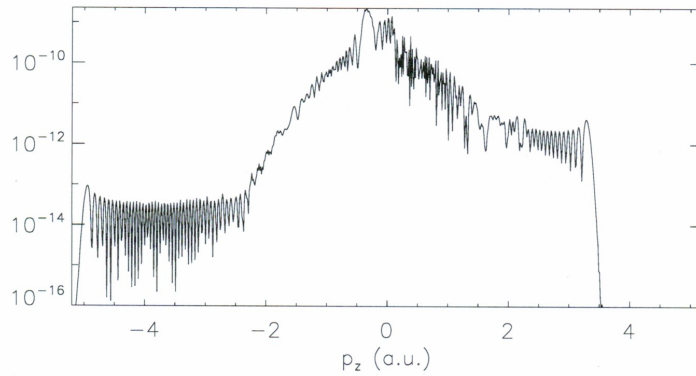
In der folgenden Abb. ist (8) für  $\hat{E} = 0.05338$ ,  $\omega = 0.0228$  ( $100 \text{ TW/cm}^2$ ,  $2 \mu\text{m}$ ) für einen  $n=3$ -zyklischen  $\sin^2$ -Puls und  $a=\lambda=1$ ,  $b=0$  berechnet. Im Impulsspektrum ( $p_z = p_{\parallel}$ ) sieht man ringartige Strukturen, die bis

$$p_{\parallel, \text{max}} = 5.2 \Rightarrow E_{\text{max}} = \frac{p_{\parallel, \text{max}}^2}{2} \approx 10 U_p$$

reichen. Außerdem ist das Impulsspektrum asymmetrisch bzgl.  $p_{\parallel} \rightarrow -p_{\parallel}$ , wohingegen (9) ein symmetrisches Spektrum liefert.

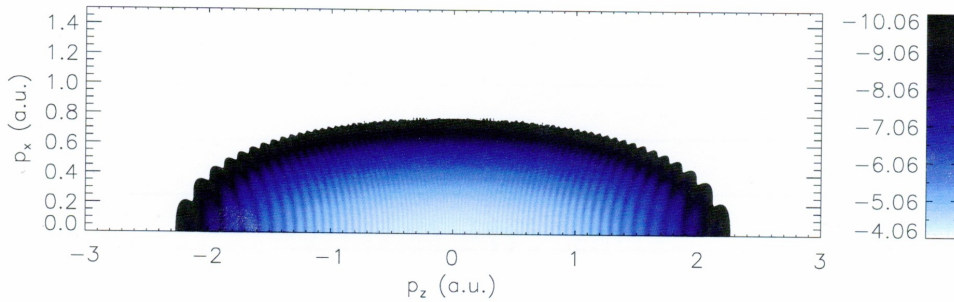
Matrixelement (8)

49



für  $\hat{E} = 0.05338$ ,  $\omega = 0.0228$ ,  $n = 3$ ,  $a = \lambda = 1$ ,  $b = 0$ .

Matrixelement (9)



für die gleichen Parameter

Die ringartigen Strukturen im Richtstreuungsspektrum lassen sich ebenfalls mit klassischen Trajektorien verstehen:  $(\vec{p} \times \vec{r}) + \vec{p} \times \vec{v} = (\vec{p} \times \vec{r}) - (\vec{p} \times \vec{p}) = \vec{p} \times \vec{r}$

1. Elektron wird zum Louisvillzeitpunkt  $t_0$  freigesetzt  $\Rightarrow v(t > t_0) = A(t) - A(t_0)$

$$z(t > t_0) = \alpha(t) - \alpha(t_0) - \underbrace{A(t_0)(t - t_0)}$$

2. zum Zeitpunkt  $t'$  kommt Elektron zum Kern zurück:

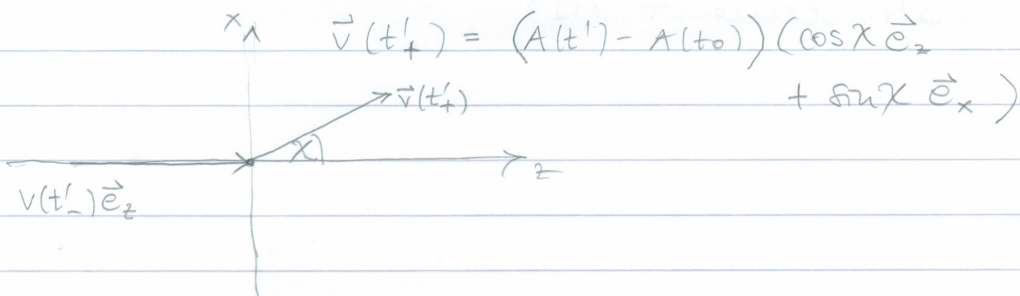
$$|z(t')| = |\alpha(t') - \alpha(t_0) - A(t_0) \tau| \stackrel{!}{\sim} \frac{1}{2} \varepsilon$$

$\varepsilon \ll 1 \text{ a.u.}$

3. Geschw. bei der Rückstreuung (unverzerrtes. vor Stoß)

$$v(t'_-) = A(t') - A(t_0)$$

4. Geschw. kurz nach dem Stoß:



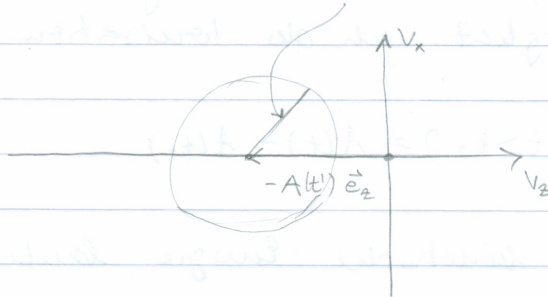
$$5. \vec{v}(t > t') = (A(t') - A(t_0)) (\cos \chi \vec{e}_z + \sin \chi \vec{e}_x)$$

$$+ (A(t) - A(t')) \vec{e}_z$$

Am Ende des Pulses:

$$\vec{v}_{t/t_0} = (A(t') - A(t_0)) (\cos \chi \vec{e}_z + \sin \chi \vec{e}_x) - A(t') \vec{e}_z$$

Als Funktion von  $\chi$  beschreibt diesen Ausdruck  
 um  $-A(t')$  entlang der  $V_2$ -Achse verschobene  
Kreise mit Radius  $|A(t') - A(t_0)|$



Im Extremfall  $\chi = \pi$  (Reflexion)

$$\begin{aligned} V_{t',t_0}^{180^\circ} &= (A(t') - A(t_0))(-1) - A(t') \\ &= A(t_0) - 2A(t') \end{aligned}$$

sodass 
$$E_{t',t_0}^{180^\circ} = \frac{1}{2} (A(t_0) - 2A(t'))^2$$

Sucht man alle Paare  $(t', t_0)$ , für die  
 $|z(t')| < \varepsilon$  erfüllt ist, so findet man

$$E_{t',t_0}^{180^\circ} \leq 10 \mu\text{p},$$

in Übereinstimmung mit dem obigen Beispiel  
 in den Abbildungen.

→ Bild [cutoffdetesminationscontour.pdf](#)

## Hohe harmonische Erzeugung

Ober haben wir in Zusammenhang mit Rückstreuung die Geschwindigkeit nach der Ionisation

$$v(t > t_0) = A(t) - A(t_0)$$

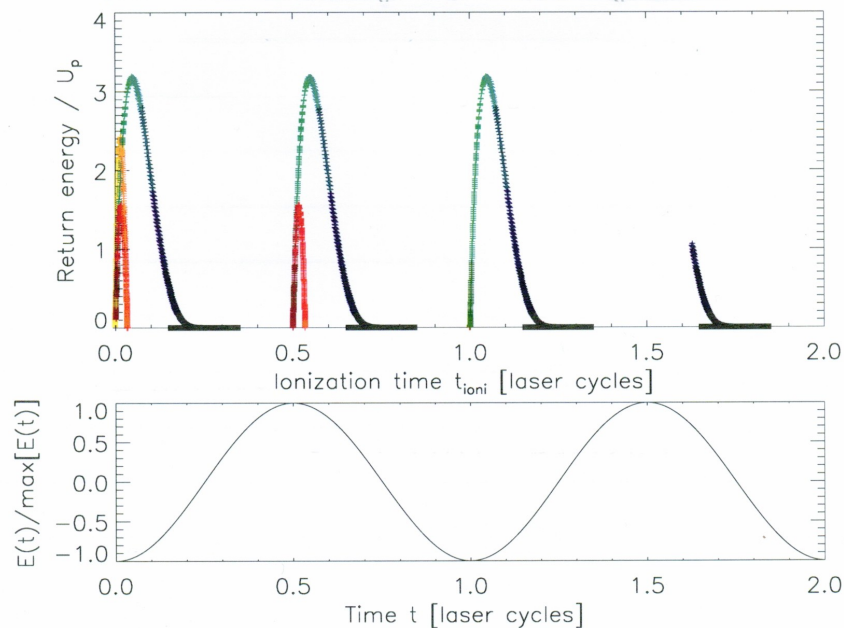
betrachtet. Die kinetische Energie lautet also

$$E_{\text{kin}}(t > t_0) = \frac{1}{2} v^2 = \frac{1}{2} [A(t) - A(t_0)]^2.$$

Die Bedingung, dass das Elektron zurückkommt lautet

$$|z(t')| = |\alpha(t') - \alpha(t_0) - A(t_0)(t' - t_0)| < \varepsilon.$$

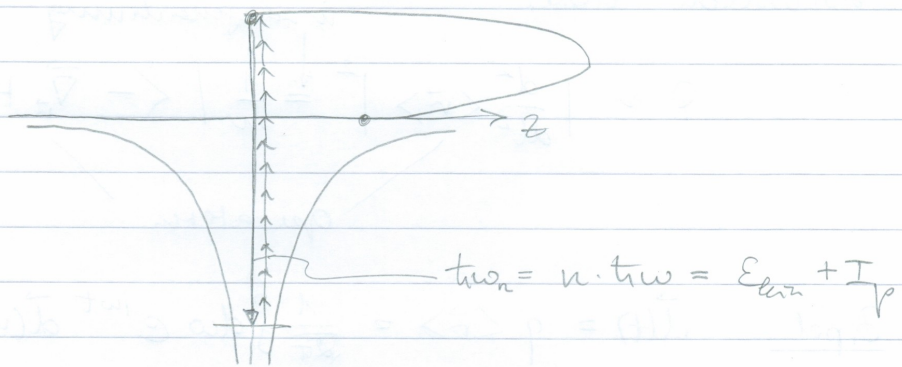
Man kann nun  $t_0$  für einen vorgegebenen Puls durchfahren und für alle Elektronen, die zurückkommen, deren Energie auftragen:



Die Farbe kennzeichnet die „travel time“  $\tau$ :  
 je heller, desto länger die „travel time“  
 (grün  $\approx$  halbe Laserschwingung). Man sieht:  
 die maximale kin. Energie zum Rückkehr-  
 Zeitpunkt  $t'$  ist

$$E_{kin}^{max} \approx 3.2 U_p.$$

Kommt das Elektron zurück, so kann es mit  
 einer gewissen Wahrscheinlichkeit rekombinieren.  
 Dabei wird  $E_{kin} + I_p$  als ein energiereiches Photon  
 abgestrahlt:



$n$  kann sehr groß werden ( $> 100$ )  $\Rightarrow$  sehr  
nicht-linearer Prozess.

Wir wollen nun unseren 1D-Schrödingersolver  
 herausziehen, um „high-order harmonic generation“  
 (HOHG) zu untersuchen.

Da wir das Laserfeld nicht quantisiert haben,  
 betrachten wir auch die Abstrahlung klassisch.

Man kann zeigen, dass dies statthaft ist, sofern man Hertz in verdünnten Gasen betrachtet (Anzahl Elementen  $N \gg 1$  und nicht untereinander korreliert).

Gemäß Larmor's Formel ist die abgestrahlte Leistung

$$P = \frac{2q^2}{3c^3} |\ddot{\vec{r}}|^2, \quad (\text{Ladung } q).$$

Wir können also in unserer Formulierung die Abstrahlung in Harmonische mittels Ehrenfest berechnen über

$$P \sim \left| \frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{r} \rangle \right|^2 \stackrel{\text{in Längsrichtung}}{\downarrow} \stackrel{\text{Operator}}{=} \frac{1}{m} \left| \langle -\vec{\nabla}_{\vec{r}} H \rangle \right|^2. \quad (c)$$

Dipol  $\vec{d}(t) = q \langle \vec{r} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega t} \vec{d}(\omega)$

Also ist die abgestrahlte Energie

$$E_{\text{rad}} = \int_{-\infty}^{\infty} P dt = \frac{2}{3c^3} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \omega^2 \omega'^2 e^{i(\omega-\omega')t} \times \vec{d}^*(\omega') \vec{d}(\omega)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega-\omega')t} = 2\pi \delta(\omega-\omega')$$

$$\Rightarrow \frac{2}{3c^3} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega^4 |\vec{d}(\omega)|^2$$

und die in ein spektrales Intervall abgestrahlte