Física del Attosegundo

Ejercicio Computacional Final

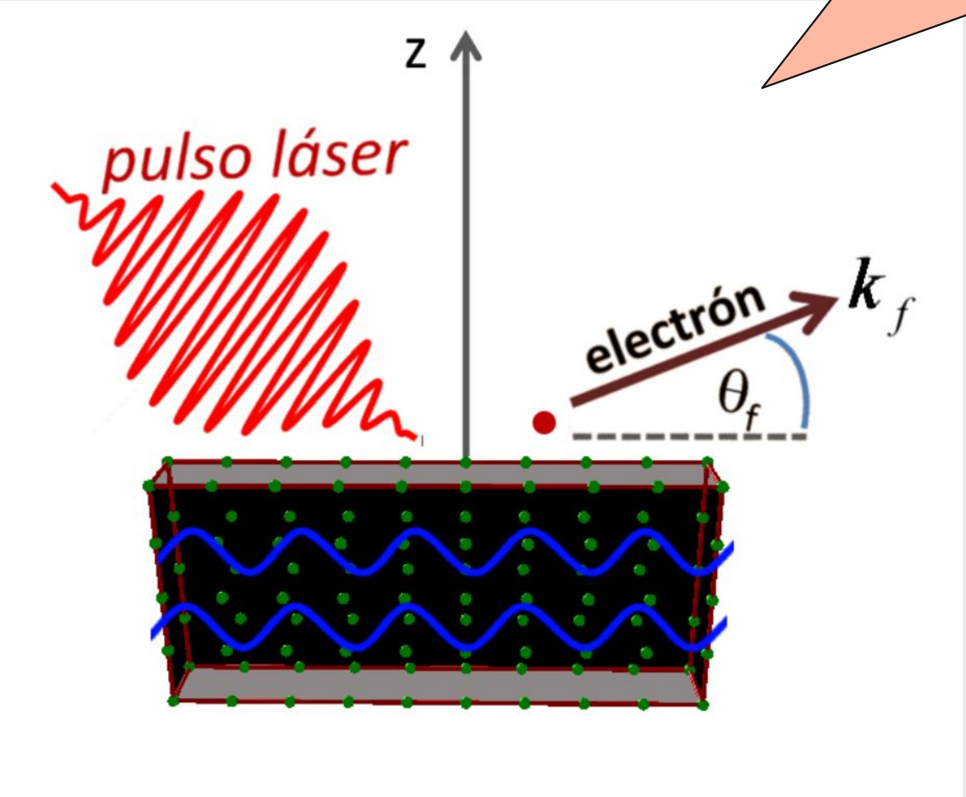
1er Cuatrimestre 2024

Martín Barlari

Ejercicio computacional

Esquema básico

❗ **Pulse**-generated **photoelectric effect** ❗



Ejercicio computacional

Problema a resolver (Single Active Electron approx - SAE)

1. Electrón en **estado ligado** bajo la influencia del *potencial superficial*
2. Interactúa con el **pulso láser**
3. Como resultado, el electrón es *ionizado* a un **estado del continuo**
4. Calculamos la **probabilidad de ionización** en función de la energía del electrón ionizado

→ *¿Cómo modelamos la interacción* ***superficie-SAE****?* 🤔

Ejercicio computacional

Modelo superficial: Jellium

Elegimos los parámetros de forma tal que tenga **1 solo estado ligado** y lo centramos en 100 a.u:

- ➢ a = 3
- ➢ V_0 = 0.5
- ➢ z_c = 100

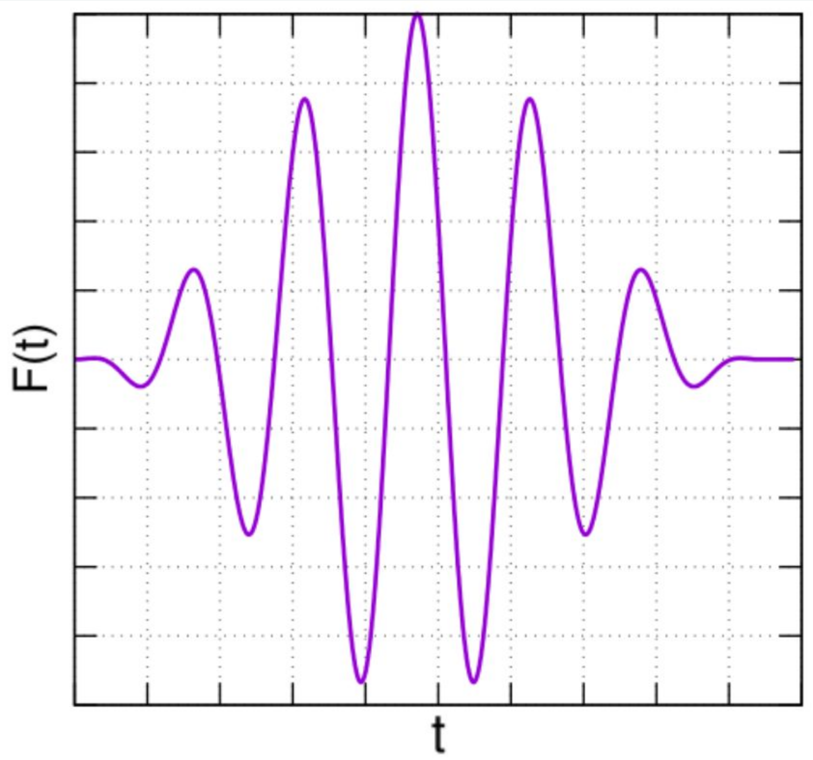
$$V_S(z) = \begin{cases} -V_0 & z_c - \frac{a}{2} \leq z \leq z_c + \frac{a}{2} \\ 0 & \text{otro} \end{cases}$$

⚠️Verificar que el estado ligado sea único y tenga energía **E = -0.314 a.u.**

⚠️ ¿Qué caja (dominio) usamos?

Ejercicio computacional

Pulso láser



*G. Saathoff et al, Phys. Rev. A, vol. 77, p. 022903, Feb 2008.

$$F(t) = \begin{cases} F_0 \underbrace{\sin(\omega_p t + \phi)}_{\text{Portadora}} \underbrace{\sin^2(\pi t/\tau)}_{\text{Envolvente}} & 0 \le t \le \tau \\ 0 & t > \tau, \end{cases}$$

F_0: amplitud

ω_p: frecuencia portadora

ϕ: carrier-envelope phase (CEP)

τ = N · 2π/ω_p: duración

N: cantidad de ciclos

Usaremos (a.u.):

- ➔ **$\omega_p = 0.8$**
- ➔ **$F_0 = 0.5$**
- ➔ **N = 6**
- ➔ **$\phi = \omega_p\tau/2 + \pi/2$**

(pulso simétrico)

Ejercicio computacional

Hamiltoniano

Debemos resolver la Ec. de Schrödinger:

$$\boxed{i\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \hat{H}(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)}$$

(a.u.)

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \text{funcion de onda del SAE}$$

El Hamiltoniano lo dividimos en 2 partes:

$$\hat{H}(\mathbf{r},t) = \hat{H}_0(\mathbf{r}) + \hat{H}_1(\mathbf{r},t)$$

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}) = -\frac{\nabla_r^2}{2} + \overbrace{V_S(\mathbf{r})}^{\text{Jellium}}$$

Parte independiente del tiempo: término cinético e interacción c/superf

$$\hat{H}_1(\mathbf{r},t) = \mathbf{r}\cdot\mathbf{F}(t)$$

Parte dependiente del tiempo: interacción con el pulso en length gauge

Pulso láser polarizado linealmente

$$\hat{H}_1(\mathbf{r},t) = z\cdot F(t), \quad \mathbf{F}(t) = F(t)\,\hat{\mathbf{z}}$$

Ejercicio computacional

Resolución del problema

$$i\frac{\partial \Psi(z,t)}{\partial t} = \hat{H}(z,t)\Psi(z,t)$$

$$\hat{H}(z,t) = \hat{H}_0(z) + \hat{H}_1(z,t)$$

$$\hat{H}_0(z) = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dz^2} + V_S(z)$$

$$\hat{H}_1(z,t) = zF(t)$$

⚠️ Estado inicial: el único estado ligado de H_0

1. Diagonalizamos H_0
2. El estado ligado de H_0, lo propagamos en el tiempo bajo el H completo
3. Proyectamos el estado ligado propagado con los estados del continuo* de H_0 y calculamos el espectro de fotoionización.

** Una vez apagado el láser, el SAE queda a merced del potencial superficial exclusivamente. Debemos por ende proyectar en los autoestados de H_0*

Ejercicio computacional

(1) Diagonalización de H_0

$$\hat{H}_0(z)\phi(z) = E\phi(z)$$

$$\hat{H}_0(z) = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dz^2} + V_S(z)$$

Obtenemos el estado ligado ϕ_1(z) y estados del continuo ϕ_k(z)

⚠️ Recordar discretización de un H cinético independiente del tiempo acá ⚠️

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \frac{1}{(\Delta x)^2} + V_0 & -\frac{1}{2(\Delta x)^2} & 0 & 0 & \dots \\ -\frac{1}{2(\Delta x)^2} & \frac{1}{(\Delta x)^2} + V_1 & -\frac{1}{2(\Delta x)^2} & 0 & \dots \\ 0 & -\frac{1}{2(\Delta x)^2} & \frac{1}{(\Delta x)^2} + V_2 & -\frac{1}{2(\Delta x)^2} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2(\Delta x)^2} & \frac{1}{(\Delta x)^2} + V_N \end{pmatrix}$$

Ejercicio computacional

(2) Propagación de ϕ_1

$$\begin{cases} i\dfrac{\partial \Psi(z,t)}{\partial t} = \hat{H}(z,t)\Psi(z,t) \\ \Psi(z,t=0) = \phi_1(z) \end{cases} \Longrightarrow$$

Obtenemos estado propagado en el tiempo:

$$\Psi(z,t)$$

⚠️ Aplicar algún algoritmo de propagación temporal (ver acá)
⚠️Verificar que durante la propagación **la norma se mantenga unitaria**

Ejercicio computacional

(3) Proyección de Ψ(z,t) y probabilidad de emisión electrónica

$$a_k = \langle \Psi(z,t) | \phi_k(z) \rangle$$

ϕ_k**(z):** estado del continuo

$|a_k|^2$: probabilidad de emisión electrónica con momento *k* tal que $E = k^2/2$

Como la base (ligados "l" + continuos "k") es completa y *discreta*:

$$1 = \sum_l |a_l|^2 + \sum_k |a_k|^2$$

$$1 = P_{surv} + P_{ion}$$

P_{surv} = probabilidad de supervivencia total (el estado propagado queda *ligado al material*)

P_{ion} = probabilidad de ionización total

⚠️ Chequear que efectivamente la base sea completa

Ejercicio computacional

(3) Proyección de Ψ(z,t) y probabilidad de emisión electrónica

Queremos la **distribución de probabilidad de ionización** dP_k/dE_k tal que:

Probabilidad de emisión electrónica con momento entre k_1 y k_2

$$= \int_{E_{k_1}}^{E_{k_2}} \frac{dP_k}{dE_k} dE_k$$

Por ende, el **espectro de probabilidad de emisión electrónica** en función de la energía del continuo E_k es;

$$\boxed{P(E_k) = \frac{dP_k}{dE_k} = \frac{|a_k|^2}{\Delta E_k}}$$

⇨ Graficar $P(E_k)$ vs E_k

Ejercicio computacional

(4) Estudiar dependencias con parámetros del láser

¿Qué ocurre con el espectro de probabilidad si variamos para el láser los parámetros básicos?

- **F_0** (amplitud)
- **ω_p** (frecuencia portadora)
- **n** (cantidad de ciclos)

⚠️ Recordar picos de ionización multifotónica:

$$\boxed{E_{k,n} \approx (1+n)\,\omega_p - E_p - \overbrace{|E_i|}^{\text{Energía del ligado inicial}}}$$

n=0 → pico principal

n=1 → primer pico secundario (etc ...)

$$E_p = \frac{F_0^2}{4\,\omega_p^2}$$

(energía ponderomotriz)

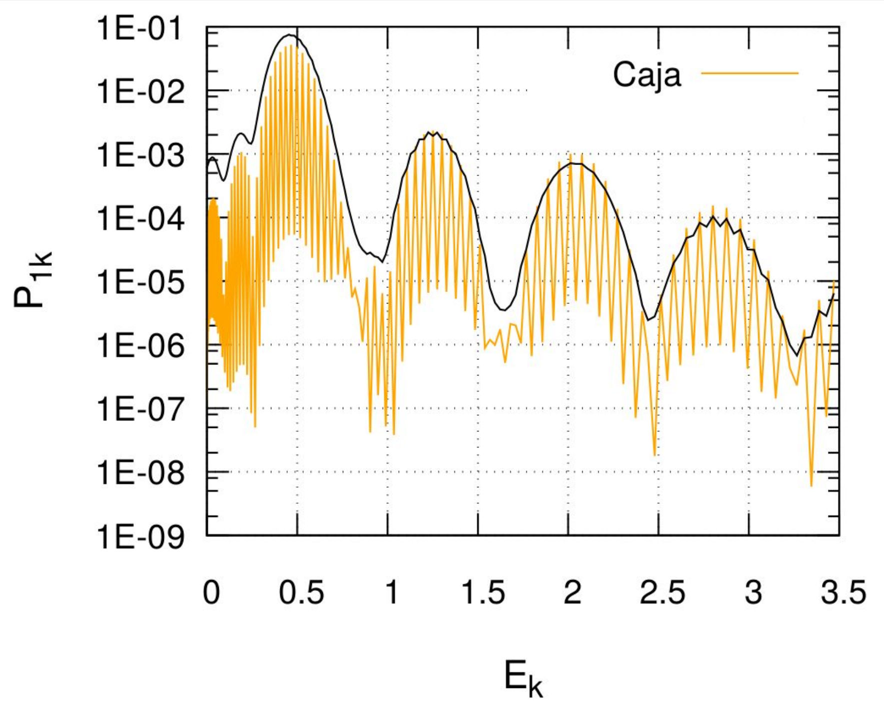
Ejercicio computacional

Resumen

1. **Diagonalizamos** H_0
2. El estado ligado de H_0, lo **propagamos en el tiempo** bajo el H completo
3. **Proyectamos** el estado ligado propagado con los estados del **continuo** de H_0 y calculamos el **espectro de fotoionización**

Ejercicio computacional

Ejemplo



Ejercicio computacional

Ejemplo: método Staggered Leapfrog

Discretizando la Ec. de Schrödinger:

$$-i\hat{H}\Psi(t) = \frac{d\Psi(t)}{dt} = \frac{\Psi(t+\Delta t) - \Psi(t-\Delta t)}{2\Delta t}$$

Despejamos

$$\Psi(t+\Delta t) = -i\,2\,\Delta t\,\hat{H}\,\Psi(t) + \Psi(t-\Delta t)$$

Propagando medio paso temporal:

$$\Psi(t+\frac{\Delta t}{2}) = -i\,\Delta t\,\hat{H}\,\Psi(t) + \Psi(t-\frac{\Delta t}{2})$$

$$\boxed{\Psi(t+\Delta t) = -i\,\Delta t\,\hat{H}\,\Psi(t+\frac{\Delta t}{2}) + \Psi(t)}$$