Helium im starken Feld

Betrachtung zur Adiabatizitätszeit in der Näherung des plötzlichen Anschaltens

BACHELORARBEIT

zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science
(B. Sc.)
im Fach Physik

eingereicht an der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I
Institut für Physik
Humboldt-Universität zu Berlin

von
Herr Ingmar Schubert
geboren am 10.04.1995 in Saarbrücken

Gutachter:

1. *Prof. Dr. Alejandro Saenz*
2. *Prof. Dr. Kurt Busch*

eingereicht am: *10. November 2016*

Zusammenfassung

Durch Betrachtung des Ionisationsverhaltens des Grundzustandes des Heliumatoms, das während einer endlichen Zeitspanne einem plötzlich angeschalteten, konstanten elektrischen Feld ausgesetzt wird, wird eine feldcharakteristische Zeitskala, auf der die Wellenfunktion der geänderten Potentialform folgen kann, bestimmt. Dazu wird eine volle Konfigurationswechselwirkungsrechnung (CI) für den Zweiteilchen-Hamiltonoperator in komplexer Skalierung durchgeführt. Diese Zeitskala wird verglichen mit der semiklassisch motivierten sog. Keldyshzeit aus der Keldyshtheorie. Implikationen der gefundenen Ergebnisse für die Interpretation der Experimente zur sog. Tunnelzeit werden diskutiert.

Inhaltsverzeichnis

1 Motivation **4**

2 Theoretische Grundlagen **6**
2.1 Helium in starken Feldern 6
2.1.1 Hamiltonoperator ohne elektromagnetisches Feld 6
2.1.2 Hamiltonoperator mit elektromagnetischem Feld 7
2.2 Komplexe Skalierung 12
2.2.1 Eigenschaften des skalierten Hamiltonoperators 12
2.2.2 Physikalische Bedeutung des Spektrums von $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(0)}$ 13
2.2.3 Physikalische Bedeutung des Spektrums von $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(F)}$ 15

3 Lösungsmethode **16**
3.1 Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung 16
3.1.1 Basisfunktionen der Konfigurationswechselwirkung 16
3.1.2 Analyse der θ-Trajektorien 18
3.2 Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung 18
3.2.1 Näherung des plötzlichen Anschaltens 18
3.2.2 Bestimmung der Ionisationswahrscheinlichkeit bei endlicher Pulslänge 21

4 Ergebnisse **23**
4.1 Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung 23
4.1.1 Feldfreie Spektren 23
4.1.2 Spektren im Feld 25
4.1.3 Übergangswahrscheinlichkeitsdichte 28
4.2 Berechung der Ionisationswahrscheinlichkeit 28
4.2.1 Berechnung der Änderung der Ionisationswahrscheinlichkeit . 29
4.3 Extraktion einer Adiabatizitätszeit 30
4.3.1 Gefilterte Änderungen 31
4.3.2 Adiabatizitätszeit 32

5 Diskussion **35**
5.1 Zusammenfassung 35
5.2 Zeitpropagation: Vergleich mit der Bachelorarbeit von Sebastian Werblinski 35
5.3 Effektives Einteilchenpotential 37
5.4 Tunnelionisationszeit 37
5.5 Ionisationszeit 38

A Erläuterung zur Bahndrehimpulssymmetrie **39**

B Auszüge aus den verwendeten Programmen **41**
B.1 Auszug aus TWOSTOE 41
B.2 Berechnung der Projektion 44
B.3 Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeitsdichte 45
B.4 Propagation der zeitabhängigen Schrödingergleichung 46

C Beispielhafter Basissatz **48**

Kapitel 1

Motivation

Heliumatome, die einem starken elektromagnetischen Welchselfeld, erzeugt durch einen Laser, ausgesetzt werden, können ionisiert werden. Die physikalische Deutung dieses Ionisationsverhaltens erfolgt je nach Frequenz und Feldstärke des elektromagnetischen Feldes in unterschiedlichen Bildern. Bei kleinen Frequenzen und geringen Feldstärken ist die Annahme angebracht, dass die Reaktion des Heliumatoms auf das elektrische Feld gut in der Näherung der quasistatischen Tunnelionisation beschrieben und interpretiert werden kann.

Die genauere Untersuchtung der Ionisationsdynamik von Helium in diesem Tunnelregime ist Gegenstand einer Reihe von Experimenten von U. Keller und Mitarbeitern zur sog. Tunnelzeit [1]. Diese Experimente haben das Ziel, durch die Verwendung sehr kurzer Laserpulse eine Zeit zu messen, die ein im semiklassischen Bild tunnelndes Elektron des Heliumatoms benötigt, um die Potentialbarriere durch die Kernanziehung zu überwinden. Die konkrete Realisierung verwendet ein elliptisch polarisiertes elektomagnetisches Feld, das anschaulich als Attoclock bezeichnet wird. Der Moment, in dem der Betrag der Feldstärke maximal ist, wird als der Zeitpunkt verstanden, zu dem die Wahrscheinlichkeit am höchsten ist, dass ein Elektron in die Barriere „eintritt“. Die große Halbachse der Polarisationsellipse bezeichnet so den Zeitpunkt t_0. Unter der weiteren Annahme, dass das Elektron zum Zeitpunkt t_1 des „Austrittes“ aus der Barriere einen vernachlässigbar kleinen Impuls besitzt, wird es nach Austritt aus der Barriere in die Richtung beschleunigt, in die das Feld zum Zeitpunkt t_1 zeigt. Wird die Winkelverteilung der Photoelektronen (indirekt über die Winkelverteilung der Ionen) gemessen, so ist der Winkel zwischen dem Maximum der elektronischen Winkelverteilung und der großen Halbachse der Polarisationsellipse über die Feldfrequenz der „Tunnelverzögerungszeit“ $t_1 - t_0$ proportional. Diese Tunnelverzögerungszeit wird semiklassisch interpretiert als die Zeit, die das tunnelnde Elektron für die Durchquerung der klassisch verbotenen Tunnelbarriere benötigt.

Wie aber ist das Bild des klassischen Elektrons unter der Barriere mit dem Tunneln als nur quantenmechanisch beschreibbarer Prozess vereinbar? Anders gefragt, wie ist eine mögliche Abweichung des Maximums der elektronischen Winkelverteilung von der Richtung der großen Halbachse zu interpretieren, wenn auf die Vorstellung, dass diese Differenz eine Folge der „Flugzeit“ des Elektrons unter der Barriere ist, verzichtet wird? Dieser Frage kann nachgegangen werden, indem volle quantenmechanische Simulationen analoger Probleme durchgeführt werden, die dann auch quantenmechanische Interpretationen ermöglichen.

Unter anderem wurden von G. Orlando *et al.* [2] numerische Experimente durch-

geführt, die die Zeitentwicklung der Ionisationsrate eines eindimensionalen Modellquantenpunktes in einem plötzlich angeschalteten, konstanten elektrischen Feld untersuchen. Dieses plötzliche Anschalten des Feldes ermöglicht es, eine charakteristische Zeit, nach der die Wellenfunktion dem geänderten Potential folgen kann, in diesem Sinne also eine Adiabatizitätszeit, zu berechnen. Es wird dort dafür plädiert, dass gemessene Tunnelverzögerungszeiten eine Folge davon seien, dass die elektronische Wellenfunktion dem sich zeitlich ändernden Potential der Attoclock nicht instantan, sondern nur auf der durch die Adiabatizitätszeit vorgegebenen Zeitskala folgen kann. Es wird ein proportionaler Zusammenhang zwischen dieser Adiabatizitätszeit und der in [3] eingeführten Keldyshtheorie hergestellt.

Insbesondere führt diese Feststellung der Trägheit der Wellenfunktion auf das Dilemma, dass eine idealisierte Messung einer Ionisationszeit im Sinne des Attoclock-Experimentes — ein δ-förmiger Puls gepaart mit einem Mechanismus, der die Zeitverzögerung des Austritts eines Elektrons misst — zur Folge hätte, dass überhaupt keine Ionisation festgestellt werden kann. Da die Wellenfunktion träge auf ein angelegtes Feld reagiert, bleibt sie durch den infinitesimal kurzen Puls unverändert.

Den Ansatz aus [2] greift Sebastian Werblinski in seiner Bachelorarbeit [4] auf, hier wird aber mit Wasserstoff bereits ein realistisches System betrachtet. Es werden diabatische und adiabatische Effekte der Ionisation in — wie in [2] auch — plötzlich angeschalteten Feldern verglichen und in Analogie zu [2] festgestellt, dass adiabatische Ionisationsdynamik erst nach einer endlichen Zeitspanne eintritt. Auch hier wird der Zusammenhang mit der Keldyshzeit betrachtet.

Da die Experimente zur Tunnelverzögerungszeit mit Helium durchgeführt wurden, analoge theoretische Betrachtungen für das Heliumatom aber bisher fehlen, ist es ein natürlicher Schritt, die Betrachtungen in [2] und [4] für den Modellquantenpunkt bzw. das Wasserstoffatom auf Helium im vollen Zweiteilchenbild zu übertragen. Das ist das Ziel der vorliegenden Arbeit. In fortführender Analogie zu den beiden genannten Arbeiten wird die Ionisationswahrscheinlichkeit von Helium als Funktion der Feldstärke und Dauer eines plötzlich an- und wieder ausgeschaltenen elektrischen Feldes berechnet und ein Verfahren motiviert, daraus eine charakteristische minimale Pulsdauer zu berechnen, ab der der Ionisationsprozess adiabatische Charakteristik aufweist. Es kann gezeigt werden, dass diese minimale Pulsdauer im Zusammenhang mit der Keldyshzeit steht. Was daraus für die Interpretation der eingangs vorgestellten Experimente abgeleitet werden kann, ist zentraler Bestandteil der Diskussion.

Die theoretischen Grundlagen der Methodik werden in Kapitel 2 diskutiert, die konkrete Vorgehensweise in Kapitel 3. Die Ergebnisse werden in Kapitel 4 vorgestellt und in Kapitel 5 diskutiert.

Kapitel 2

Theoretische Grundlagen

Sofern nicht anders vermerkt, werden in diesem und allen folgenden Kapiteln atomare Einheiten verwendet. Physikalische Größen und Gleichungen werden also in Einheiten von $\hbar$, $4\pi\epsilon_0$, der Elektronenmasse m_e und der Elementarladung e dargestellt.

2.1 Helium in starken Feldern

2.1.1 Hamiltonoperator ohne elektromagnetisches Feld

Der nichtrelativistische Hamiltonoperator eines Heliumatoms ohne äußeres elektrisches Feld unter Vernachlässigung der Spin-Bahn-Kopplung lautet nach [5] in den Koordinaten $\vec{R}$ des Schwerpunktes und $\vec{r}_\mathrm{i}$ der Elektronen relativ zum Kern

$$\hat{\mathrm{H}}^{(0)} = \hat{\mathrm{T}}_{\vec{R}} + \hat{\mathrm{T}}_{\{\vec{r}_\mathrm{i}\}} + \hat{\mathrm{V}}_{\{\vec{r}_\mathrm{i}\}} \quad . \tag{2.1}$$

$\hat{\mathrm{T}}_{\vec{R}}$ ist der Term für die kinetische Energie des Schwerpunktes,

$$\hat{\mathrm{T}}_{\{\vec{r}_\mathrm{i}\}} = -\frac{1}{2\mu}\sum_{\mathrm{i}=1}^{2}\vec{\nabla}^2_{\vec{r}_i} - \frac{1}{M}\vec{\nabla}_{\vec{r}_1}\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} \tag{2.2}$$

der Anteil der elektronischen kinetischen Energie, und

$$\hat{\mathrm{V}}_{\{\vec{r}_\mathrm{i}\}} = -\sum_{\mathrm{i}=1}^{2}\frac{2}{r_\mathrm{i}} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \tag{2.3}$$

ist der Anteil der elektronischen potentiellen Energie. M bezeichnet dabei die Masse des Kernes; $\mu = \frac{M}{1+M}$ ist die reduzierte Masse eines Elektrons bezüglich des Kerns.

2.1.1.1 Unendlich schwerer Kern

Unter der Annahme einer unendlich großen Kernmasse — tatsächlich liegt diese 3 Größenordnungen über der Masse der Elektronen — verschwindet der sog. Massenpolarisationsterm in $\hat{\mathrm{T}}_{\{\vec{r}_\mathrm{i}\}}$, also

$$-\frac{1}{M}\vec{\nabla}_{\vec{r}_1}\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} \approx 0 \quad , \tag{2.4}$$

und $\mu \approx 1$. Im feldfreien Fall ist die Lösung der stationären Schrödingergleichung das Tensorprodukt der Lösungen der Schwerpunktbewegung $\hat{\mathrm{T}}_{\vec{R}}$ und der elektronischen

Bewegung $\hat{\mathrm{T}}_{\{\vec{r}_\mathrm{i}\}} + \hat{\mathrm{V}}_{\{\vec{r}_\mathrm{i}\}}$. Im Schwerpunktsystem ergibt sich deshalb der Hamiltonoperator im feldfreien Fall unter Annahme eines unendlich schweren Kerns zu

$$\hat{\mathrm{H}}^{(0)} = \sum_{\mathrm{i}=1}^{2} \left(-\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2_{\vec{r}_\mathrm{i}} - \frac{2}{r_\mathrm{i}} \right) + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad , \tag{2.5}$$

und nimmt damit unter Verwendung des Impulsoperators $\hat{\vec{\mathrm{p}}}_\mathrm{i} = \frac{1}{i}\vec{\nabla}$ die Form

$$\hat{\mathrm{H}}^{(0)} = \sum_{\mathrm{i}=1}^{2} \left(\frac{\hat{\mathrm{p}}^2}{2} - \frac{2}{r_\mathrm{i}} \right) + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \tag{2.6}$$

an.

2.1.2 Hamiltonoperator mit elektromagnetischem Feld

Im Feld ist die Separation in Schwerpunkt- und Elektronenbewegung im Allgemeinen nicht mehr möglich. Da aber in der Näherung eines unendlich schweren Atomkerns $\hat{\mathrm{T}}_{\vec{R}}$ verschwindet, kann unter dieser Annahme auch in diesem Fall auf eine Betrachtung der Schwerpunktbewegung verzichtet werden.

2.1.2.1 Minimale Kopplung

Im Rahmen der eichinvarianten minimalen Kopplung [6] werden für die Formulierung der Schrödingergleichung eines Systems im äußeren elektromagnetischen Feld die Ersetzungen

$$\hat{\vec{\mathrm{p}}}_\mathrm{i} \to \hat{\vec{\mathrm{p}}}_\mathrm{i} - q_\mathrm{i}\vec{A}(\vec{r}_\mathrm{i}, t) \tag{2.7}$$

und

$$i\frac{\partial}{\partial t} \to i\frac{\partial}{\partial t} - q_\mathrm{i}\Phi(\vec{r}_\mathrm{i}, t) \tag{2.8}$$

durchgeführt, wobei $\vec{A}(\vec{r}, t)$ das Vektorpotential und $\Phi(\vec{r}, t)$ das skalare Potential des elektromagnetischen Feldes ist. q_i bezeichnet die Ladung des i-ten Teilchens, für die Elektronen des Heliumatoms gilt also $q_\mathrm{i} = -1$. Gleichung (2.8) entspricht der Addition eines zusätzlichen skalaren Potentials zum Hamiltonoperator. Dadurch lautet der Hamiltonoperator $\hat{\mathrm{H}}^{(F)}$ von Helium im Feld unter Annahme eines unendlich schweren Atomkerns

$$\hat{\mathrm{H}}^{(F)}(t) = \hat{\mathrm{H}}^{(0)} + \sum_{\mathrm{i}=1}^{2} \left(\frac{1}{2} \left(\hat{\vec{\mathrm{p}}}_\mathrm{i}\vec{A}(\vec{r}_\mathrm{i}, t) + \vec{A}(\vec{r}_\mathrm{i}, t)\hat{\vec{\mathrm{p}}}_\mathrm{i} + A^2(\vec{r}_\mathrm{i}, t) \right) - \Phi(\vec{r}_\mathrm{i}, t) \right) \quad . \tag{2.9}$$

2.1.2.2 Dipolnäherung

In Dipolnäherung sei angenommen, dass

$$\vec{E}(\vec{r}_\mathrm{i}, t) = \vec{E}(t) \tag{2.10}$$

gilt, also dass das elektrische Feld $\vec{E}(\vec{r}, t)$ homogen ist. In gleicher Ordnung gilt auch für das Vektorpotential $\vec{A}(\vec{r}_\mathrm{i}, t)$

$$\vec{A}(\vec{r}_\mathrm{i}, t) = \vec{A}(t) \quad . \tag{2.11}$$

Damit lässt sich das skalare Potential $\Phi(\vec{r}_\mathrm{i}, t)$

$$\Phi(\vec{r}_\mathrm{i}, t) = -\left(\vec{E}(t) + \frac{\partial \vec{A}(t)}{\partial t}\right)\vec{r}_\mathrm{i} \tag{2.12}$$

durch Integration berechnen.

In Dipolnäherung wird also nur die niedrigste Ordnung der Wechselwirkung des elektromagnetischen Feldes mit dem System betrachtet. Das elektrische Feld ist in niedrigster Ordnung homogen und das magnetische Feld verschwindet. Das Feld eines Titan-Saphir-Lasers beispielsweise, der in einem Wellenlängenbereich von in etwa 650 nm bis 1100 nm betrieben werden kann, übersteigt die Ausdehnung des Heliumatoms, die im Bereich weniger Å liegt, bei weitem, weswegen die Annahme eines homogenen Laserfeldes gerechtfertigt ist.

2.1.2.3 Längeneichung

Wie jedes physikalische Gesetz muss auch die Schrödingergleichung im elektrischen Feld invariant unter Eichtransformationen

$$\vec{A}(\vec{r}_\mathrm{i}, t) \to \vec{A}(\vec{r}_\mathrm{i}, t) + \vec{\nabla}_{\vec{r}_\mathrm{i}} f(\vec{r}_\mathrm{i}, t) \tag{2.13}$$

$$\Phi(\vec{r}_\mathrm{i}, t) \to \Phi(\vec{r}_\mathrm{i}, t) - \frac{\partial f}{\partial t}(\vec{r}_\mathrm{i}, t) \tag{2.14}$$

mit einer beliebigen Funktion $f(\vec{r}, t)$ sein. In der in dieser Arbeit verwendeten Längeneichung wird in Dipolnäherung das Vektorpotential eliminiert, indem

$$f(\vec{r}, t) = -\vec{A}(\vec{r}, t)\vec{r} \tag{2.15}$$

gewählt wird. Das bedeutet, dass die Ersetzungen

$$\vec{A}(\vec{r}_\mathrm{i}, t) \to -\vec{r}_\mathrm{i}\left(\vec{\nabla}_{\vec{r}_\mathrm{i}}\vec{A}(\vec{r}_\mathrm{i}, t)\right) \tag{2.16}$$

$$\Phi(\vec{r}_\mathrm{i}, t) \to \Phi(\vec{r}_\mathrm{i}, t) + \frac{\partial \vec{A}(\vec{r}_\mathrm{i}, t)}{\partial t}\vec{r}_\mathrm{i} \tag{2.17}$$

durchgeführt werden.

In Dipolnäherung ergibt sich dann aufgrund der Gleichungen (2.11) und (2.12)

$$\vec{A}(t) \to \vec{0} \tag{2.18}$$

$$\Phi(\vec{r}_\mathrm{i}, t) \to -\vec{E}(t)\vec{r}_\mathrm{i} \quad . \tag{2.19}$$

Einsetzen in Gleichung (2.9) ergibt den Hamiltonoperator

$$\hat{\mathrm{H}}^{(F)}(t) = \sum_{\mathrm{i}=1}^{2}\left(-\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2_{\vec{r}_\mathrm{i}} - \frac{2}{r_\mathrm{i}}\right) + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} + \vec{\mathcal{E}}(t)\,(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \tag{2.20}$$

für Helium im elektromagnetischen Feld in Längeneichung sowie unter den Annahmen eines unendlich schweren Atomkerns und der Dipolnäherung. Es wird hier und im Folgenden

$$\vec{\mathcal{E}} \equiv \vec{E} \tag{2.21}$$

geschrieben, um Verwechslungen mit der Energie E auszuschließen. Im Zusammenhang mit der komplexen Skalierung werden außerdem die Darstellungen

$$\hat{\mathrm{H}}^{(0)} = \hat{\mathrm{T}} + \hat{\mathrm{V}} + \hat{\mathrm{V}}_{12} \tag{2.22}$$

$$\hat{\mathrm{H}}^{(F)}(t) = \hat{\mathrm{T}} + \hat{\mathrm{V}} + \hat{\mathrm{V}}_{12} + \hat{\mathrm{M}}(t) \tag{2.23}$$

mit

$$\hat{\mathrm{T}} = \sum_{\mathrm{i}=1}^{2} -\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2_{\vec{r}_\mathrm{i}} \qquad \hat{\mathrm{V}} = \sum_{\mathrm{i}=1}^{2} -\frac{2}{r_\mathrm{i}} \qquad \hat{\mathrm{V}}_{12} = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \qquad \hat{\mathrm{M}}(t) = \vec{\mathcal{E}}(t)\,(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \tag{2.24}$$

nützlich sein.

2.1.2.4 Statisches Feld

Wird ein stationäres Feld angenommen, also $\vec{\mathcal{E}}(t) = \vec{\mathcal{E}}$, so lässt sich die Schrödingergleichung zeitunabhängig lösen. Wird zusätzlich — aufgrund der Rotationssymmetrie des feldfreien Potentials ohne Beschränkung der Allgemeinheit — $\vec{\mathcal{E}} = \mathcal{E}\vec{e_\mathrm{z}}$ angenommen, so ergibt sich die in Abbildung 2.1 in der x-z-Ebene dargestellte effektive Potentialform

$$V_\mathrm{eff}(\vec{r}) = -\frac{2}{r} + \mathcal{E} \cdot z \quad . \tag{2.25}$$

Es entsteht also ein Potentialtopf am Ursprung und eine Barriere endlicher Breite

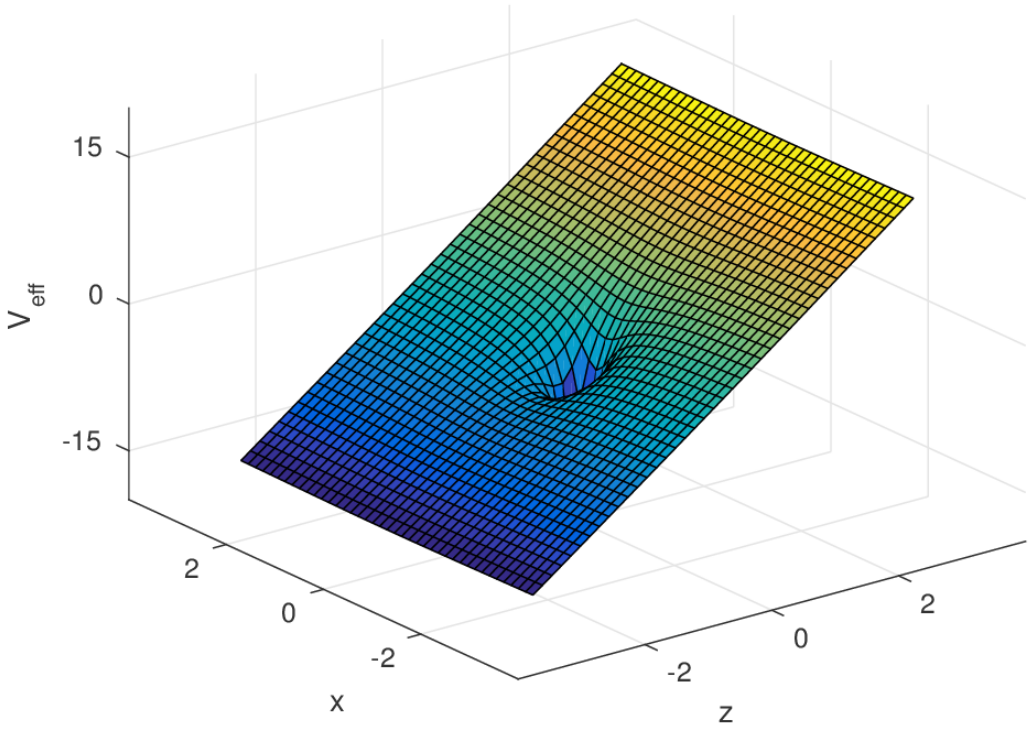

Abbildung 2.1: Darstellung des effektiven Potentials $V_\mathrm{eff}(\vec{r})$ in der x-z-Ebene

und Höhe, die den Potentialtopf abtrennt.

Betrachtet sei nun ein *Einteilchen*wellenpaket $\psi(\vec{r},t)$, das zum Zeitpunkt $t=0$ im Ursprung des Potentials $V_{\text{eff}}(\vec{r})$ konzentriert ist. Damit die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $|\psi|^2(\vec{r},t)$ zeitlich variabel ist, sei der allgemeine Fall angenommen, dass $\psi(\vec{r},t)$ kein Eigenzustand des Hamiltonoperators im Feld ist. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte kann nun außerhalb des Potentialtopfes auf zwei Arten zunehmen, klassisch gesprochen kann das „Teilchen“ also auf zwei verschiedene Weisen ionisieren:

Tunneln Anteile der Wellenfunktion, deren Energie geringer ist als die von der Feldstärke $\mathcal{E}$ abhängigen Barrierenhöhe

$$V_{\text{B}} = -2\sqrt{2\mathcal{E}} \quad , \tag{2.26}$$

können den Potentialtopf nur durch Tunneln verlassen.

Over-the-barrier Anteile der Wellenfunktion, deren Energie höher ist als V_{B}, verlassen den Potentialtopf durch zeitliche Propagation über die Barriere.

2.1.2.5 Zeitabhängiges Feld

Für das Ionisationsverhalten sinusförmiger Wechselfelder der Form

$$\vec{\mathcal{E}}(t) = \vec{\mathcal{E}}_0 \sin(\omega t) \tag{2.27}$$

trifft die Keldysh-Theorie wichtige Aussagen (siehe [3]). Kern ist der Keldysh-Parameter

$$\gamma_{\text{Kel}} = \frac{\omega}{\omega_{\text{t}}} \quad , \tag{2.28}$$

der die Wechselfeldfrequenz ω mit einer für das System charakteristischen Grenzfrequenz ω_{t} vergleicht. ω_{t} gibt die maximale Frequenz des Feldes an, bis zu der die elektronische Wellenfunktion der Bewegung des Potentials noch adiabatisch folgen kann. Diese Frequenz wird in [3] semiklassisch für das Wasserstoffatom über die Breite der Potentialbarriere begründet, und beträgt

$$\omega_{\text{t}} = \frac{\mathcal{E}}{\sqrt{2I_{\text{p}}}} \quad , \tag{2.29}$$

wobei I_{p} das Ionisationspotential und $\mathcal{E}$ die Amplitude der elektrischen Feldstärke des Wechselfeldes ist.

Die Schlussfolgerung ist, dass für $\omega \ll \omega_{\text{t}}$, also $\gamma_{\text{Kel}} \ll 1$, das Ionisationsverhalten des Systems nur von der momentanen Feldstärke und nicht von der Frequenz abhängt, insbesondere ist die Ionisationsrate demzufolge nicht frequenzabhängig. Dieses Regime wird als quasistatisch bezeichnet, und es treten prinzipiell die in 2.1.2.4 erläuterten Ionisationsarten auf. Für $\gamma_{\text{Kel}} \gg 1$ kann die Wellenfunktion dem sich periodisch ändernden Feld nicht mehr adiabatisch folgen, es treten daher frequenzabhängige Effekte auf.

Umgekehrt kann das System einem Wechselfeld der Periodendauer T adiabatisch folgen, solange diese unterhalb der Größenordnung τ_t mit

$$\tau_\mathrm{t} = \frac{1}{\omega_\mathrm{t}} = \frac{\sqrt{2I_\mathrm{p}}}{\mathcal{E}} \tag{2.30}$$

bleibt. Die Zeitentwicklung des Systems, wenn es Pulsen deutlich kleinerer Periodendauer ausgesetzt wird, kann nicht mehr adiabatisch behandelt werden. Die Zeit τ_t wird im Folgenden Keldyshzeit genannt werden.

Abbildung 2.2 gibt eine Übersicht über den dominierenden Ionisationsmechanismus in Abhängigkeit der Feldstärke und der Frequenz für Wasserstoff. Unterhalb

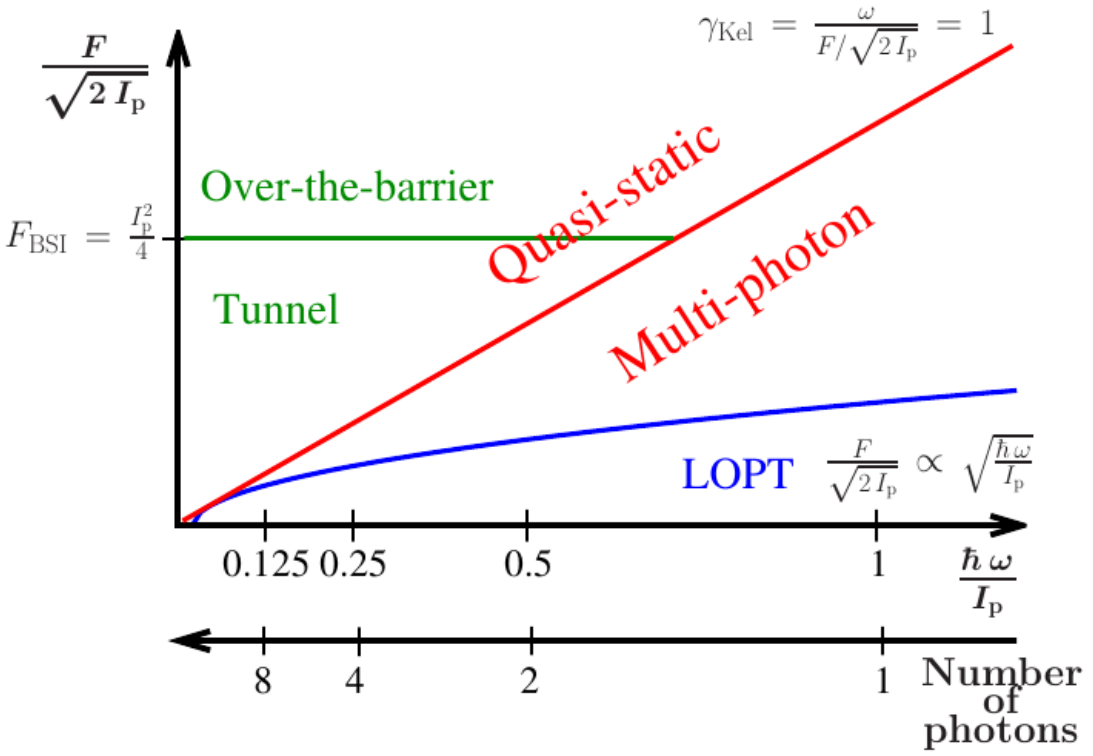

Abbildung 2.2: Unterteilung der Ionisationsarten von Wasserstoff anhand der Feldstärke und der Frequenz des Laserfelds. Die Feldstärke $\mathcal{E}$ wird in dieser Grafik mit F bezeichnet. Abbildung entnommen aus einem gruppeninternen Vortrag von Prof. Dr. Alejandro Saenz.

einer Grenzfrequenz, die der jeweiligen Feldstärke nach Gleichung (2.29) proportional ist, kann die Wellenfunktion dem zeitlich veränderlichen Potential adiabatisch folgen, und die Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung (TDSE) kann quasistatisch behandelt werden. Folglich ist auch die Grenze zwischen over-the-barrier-Ionisation und Tunnelionisation nicht frequenzabhängig. Bei kleineren Feldern wird das Kernanziehungspotential weniger stark verformt, die Grundzustandsresonanz ionisiert vornehmlich durch Tunneln, bei hohen Feldstärken ist die Verformung stärker und die Barriere niedriger, sodass die Energie ausreicht, um über die Barriere hinweg zu ionisieren.

Oberhalb der Grenzfrequenz ist die quasistatische Näherung nicht mehr angebracht, die Ionisationsdynamik wird im sog. Multiphotonenregime frequenzabhängig. Mit steigender Frequenz sinkt die Anzahl der Photonen, die zur Überwindung

des Ionisationspotentials benötigt werden, auf 1. Für sehr niedrige Feldstärken kann die Ionisation durch Störungstheorie der niedrigsten Ordnung (LOPT) behandelt werden.

Die Unterteilung in over-the-barrier-Ionisation und Tunnelionisation gilt im Einteilchenfall und lässt sich für Helium nur näherungsweise unter Einbeziehung von effektiven Einteilchenpotentialen (siehe z.B. [7]) verallgemeinern. Auch für Helium existiert aber eine — mutmaßlich feldstärkenabhängige — Grenzfrequenz, ab der der Ionisationsprozess nicht mehr quasistatisch behandelt werden kann. Diese wird in dieser Arbeit untersucht werden.

2.2 Komplexe Skalierung

Komplexe Skalierung [8] ist eine Transformation des Hamiltonoperators, die aus einer Transformation der Radialkoordinaten r_i hervorgeht. Im einfachsten Fall des *uniform complex scaling* lautet diese Transformation

$$r_\mathrm{i} \to r_{\mathrm{i},\theta} = \exp(i\theta) \cdot r_\mathrm{i} \tag{2.31}$$

mit $|\theta| \leq \frac{\pi}{2}$.

Für die Hamiltonoperatoren des Heliumatoms außerhalb und im Laserfeld (Gleichungen (2.22) und (2.23)) folgt entsprechend

$$\hat{\mathrm{H}}^{(0)} \to \hat{\mathrm{H}}^{(0)}_\theta = \hat{\mathrm{T}}_\theta + \hat{\mathrm{V}}_\theta + \hat{\mathrm{V}}_{12,\theta} \tag{2.32}$$

$$\hat{\mathrm{H}}^{(F)}(t) \to \hat{\mathrm{H}}^{(F)}_\theta(t) = \hat{\mathrm{T}}_\theta + \hat{\mathrm{V}}_\theta + \hat{\mathrm{V}}_{12,\theta} + \hat{\mathrm{M}}_\theta(t) \tag{2.33}$$

mit

$$\begin{aligned} \hat{\mathrm{T}} &\to \hat{\mathrm{T}}_\theta = \exp(-2i\theta) \cdot \hat{\mathrm{T}} & \hat{\mathrm{V}} &\to \hat{\mathrm{V}}_\theta = \exp(-i\theta) \cdot \hat{\mathrm{V}} \\ \hat{\mathrm{V}}_{12} &\to \hat{\mathrm{V}}_{12,\theta} = \exp(-i\theta) \cdot \hat{\mathrm{V}}_{12} & \hat{\mathrm{M}}(t) &\to \hat{\mathrm{M}}_\theta(t) = \exp(i\theta) \cdot \hat{\mathrm{M}}(t). \end{aligned} \tag{2.34}$$

2.2.1 Eigenschaften des skalierten Hamiltonoperators

Folgende Überlegungen gelten analog für $\hat{\mathrm{H}}^{(0)}_\theta$ und $\hat{\mathrm{H}}^{(F)}_\theta(t)$, es wird der Platzhalter $\hat{\mathrm{H}}_\theta$ verwendet:

Durch die Transformation ist $\hat{\mathrm{H}}_\theta$ nicht mehr hermitesch. Da aber alle Summanden von $\hat{\mathrm{H}}$ (Gleichung (2.24)) hermitesch sind, ist $\hat{\mathrm{H}}_\theta$ symmetrisch, also

$$\hat{\mathrm{H}}^\dagger_\theta = \hat{\mathrm{H}}^*_\theta \quad . \tag{2.35}$$

Diese Eigenschaft überträgt sich auf die Matrixdarstellung

$$H_{\theta,\mathrm{ij}} = \langle i|\hat{\mathrm{H}}_\theta|j\rangle \tag{2.36}$$

des Hamiltonoperators in einer beliebigen, endlichen Orthonormalbasis $\{|i\rangle\}$, solange die Matrixdarstellung

$$H_\mathrm{ij} = \langle i|\hat{\mathrm{H}}|j\rangle \tag{2.37}$$

des nicht transformierten Hamiltonoperators $\hat{\mathrm{H}}$ in der gleichen Basis reell ist (siehe auch [9]). Die Matrix $H_{\theta,\mathrm{ij}}$ ist dann ebenfalls symmetrisch. Für die in dieser Arbeit

verwendeten Konfigurationen von Slater-Type-Orbitalen ist das der Fall, da diese Funktionen bis auf den Anteil der Kugelflächenfunktionen, die vom Azimutwinkel ϕ der Kugelkoordinaten abhängen, reell sind, und $\hat{\mathrm{H}}_\theta$ nicht von ϕ abhängt. Die Eigenvektoren $\vec{c}_\mathrm{i}$ der Matrix $H_{\theta,\mathrm{ij}}$ lassen sich dann biorthonormal wählen, d.h.

$$\vec{c}_\mathrm{i}{}^T \cdot \vec{c}_\mathrm{j} = \delta_\mathrm{ij} \quad . \tag{2.38}$$

Insbesondere sind die Eigenenergien von $\hat{\mathrm{H}}_\theta$ nicht mehr notwendigerweise reell, weil $\hat{\mathrm{H}}_\theta$ nicht mehr hermitesch ist.

2.2.2 Physikalische Bedeutung des Spektrums von $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(0)}$

Die Gesamtheit aller Eigenenergien des feldfreien Hamiltonoperators in einer endlichdimensionalen Repräsentation, also das Spektrum von $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(0)}$, besitzt nach [8] und [10] unter anderem die folgenden Merkmale:

2.2.2.1 Gebundene Zustände

Die Eigenenergien von $\hat{\mathrm{H}}^{(0)}$, die zu gebundenen Zuständen gehören, bleiben nach komplexer Skalierung unverändert, sind also bei $\hat{\mathrm{H}}^{(0)}$ und $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(0)}$ identisch.

Plausibel wird das durch folgende Betrachtung: Ohne komplexe Skalierung zeichnet sich ein gebundener Zustand ψ dadurch aus, dass er quadratintegrabel ist, also $\psi \in \mathcal{L}^2$. Ein einfaches Beispiel für einen solchen Zustand ist

$$\psi(\vec{r}) = \exp(-r) \quad . \tag{2.39}$$

Unter der Transformation in Gleichung (2.31)

$$\psi_\theta(\vec{r}) = \exp\left(-r\left(\cos(\theta) + i\sin(\theta)\right)\right) \tag{2.40}$$

bleibt diese Funktion $\in \mathcal{L}^2$, da nach Voraussetzung $|\theta| \leq \frac{\pi}{2}$. Die gebundenen Eigenzustände von $\hat{\mathrm{H}}$ werden von $\hat{\mathrm{H}}_\theta$ also übernommen, und die Eigenwerte ändern sich nicht.

2.2.2.2 Kontinuumszustände

Kontinuumszustände treten im Spektrum von $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(0)}$ gegenüber dem Spektrum von $\hat{\mathrm{H}}^{(0)}$ mit dem Winkel -2θ um die Schwellenenergie des Kontinuums in die untere komplexe Halbebene gedreht auf, wie in Abbildung 2.3 gezeigt.

Plausibel erscheint das nach Betrachtung von eindimensionalen ebenen Wellen als einfachstes Beispiel eines Kontinuumszustandes,

$$\psi(r) = \exp(-ikr) \tag{2.41}$$

mit der zugehörigen Eigenenergie $E = \frac{k^2}{2}$. Nach der Transformation (2.31)

$$\psi_\theta(r) = \exp\left(-ikr\left(\cos(\theta) + i\sin(\theta)\right)\right) \tag{2.42}$$

wäre $\psi_\theta(r)$ für unverändertes k nicht mehr beschränkt, was den physikalischen Randbedingungen an die Lösung widerspräche. Beschränktheit wird gewährleistet durch

$$k \to k_\theta = \exp\left(-i\theta\right) \cdot k \quad , \tag{2.43}$$

was dann der Eigenenergie $E_\theta = \exp(-2i\theta)\frac{k^2}{2}$ entspricht. Das ist also die Energie $E = \frac{k^2}{2}$, um 2θ in die untere Halbebene gedreht. Die zugehörige Schwellenenergie des Kontinuums ist hier der Nullpunkt des konstanten Potentials $V(\vec{r}) \equiv 0$, also 0.

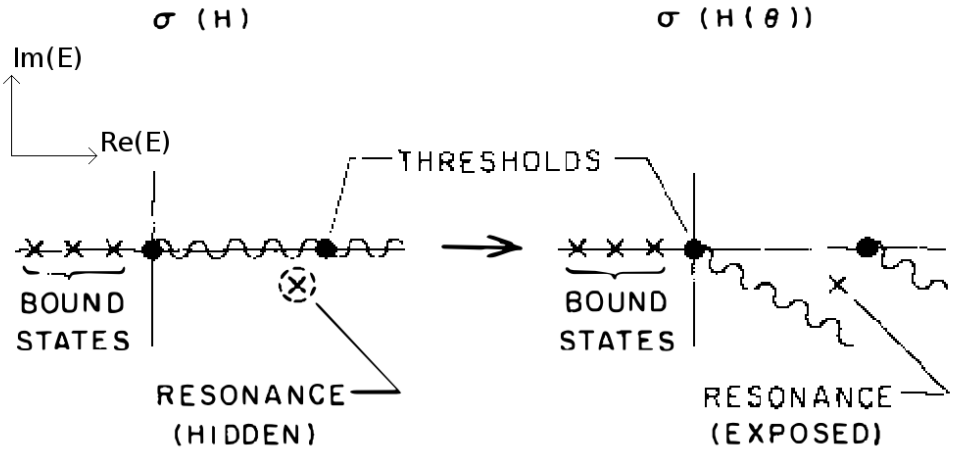

Abbildung 2.3: Schematische Darstellung der Veränderung des Spektrums nach komplexer Skalierung: Zu gebundenen Zuständen gehörende Energien bleiben unverändert, ebenso die Schwellenenergien. Energien von Zuständen des Kontinuums rotieren um ihre jeweiligen Schwellen in die untere Halbebene, Resonanzen werden aufgedeckt. Abbildung entnommen aus [10].

2.2.2.3 Resonanzzustände

Resonanzzustände, also metastabile gebundene Zustände mit der Halbwertsbreite Γ, treten im Spektrum als diskrete, θ-unabhängige Eigenwerte E_{res} mit negativem Imaginärteil auf. Ist E_{tres} die niedrigste Schwellenenergie eines Kontinuums des Spektrums, so wird der Resonanzzustand nur für

$$0 > \arg(E_{\text{res}} - E_{\text{tres}}) \geq -2\theta \tag{2.44}$$

sichtbar, also für θ, für die es Kontinuumszustände mit kleinerem Imaginärteil bei gleichem Realteil gibt. Position $\bar{E}$ und Breite Γ der Resonanz ergeben sich direkt aus Real- und Imaginärteil der komplexen Energie E_{res} (vgl. [11]), es gilt

$$E_{\text{res}} = \bar{E} - i\frac{\Gamma}{2} \quad . \tag{2.45}$$

Die zugehörigen Eigenfunktionen sind $\in \mathcal{L}^2$.

In exakter Rechnung sind die E_{res} unabhängig von der Wahl des Skalierungswinkels θ, solange die Bedingung (2.44) erfüllt ist. Bei praktischen numerischen Näherungslösungen in endlicher Basis allerdings gilt das nicht mehr. Die $E_{\text{res}}(\theta)$, ermittelt für verschiedene θ, bilden, dargestellt in der komplexen Ebene, Trajektorien, die im Folgenden θ-Trajektorien genannt werden. In der Nähe der tatsächlichen Resonanz liegen die $E_{\text{res}}(\theta)$ dichter in θ als weit davon entfernt. Wie in [11] erläutert wird, befindet sich die beste Abschätzung für die tatsächliche Position der Resonanz daher dort, wo

$$\frac{\mathrm{d}|E_{\text{res}}(\theta)|}{\mathrm{d}\theta} \tag{2.46}$$

minimal wird.

2.2.3 Physikalische Bedeutung des Spektrums von $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(F)}$

Die genannten Eigenschaften gelten nur für Hamiltonoperatoren, deren Potentiale *dilatationsanalytisch* sind. Das Coulombpotential des Kerns und der Wechselwirkung erfüllt diese Bedingung, der Dipolterm $\hat{\mathrm{M}}(t)$ (siehe Gleichung (2.24)) allerdings nicht, da er für große z divergiert. Daher gelten die in Abschnitt 2.2.2 genannten Eigenschaften im Allgemeinen nicht für den Hamiltonoperator $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(F)}$ im Feld. Im Speziellen können Eigenwerte mit positivem Imaginärteil auftreten.

In [12] wird ein Überblick zur Theorie der komplexen Skalierung im konstanten elektrischen Feld gegeben. Der Zusammenhang zwischen dem Imaginärteil der komplexen und θ-unabhängigen Eigenenergie E_{res} der Resonanzen und ihrer Breite Γ

$$E_{\mathrm{res}} = \bar{E} - i\frac{\Gamma}{2} \tag{2.47}$$

ist auch im Feld richtig, wie beispielsweise auch durch numerische Experimente für Wasserstoff in [13] nahegelegt wird.

Kapitel 3

Lösungsmethode

3.1 Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

Vor und nach dem Einschalten des elektrischen Feldes ist der Hamiltonoperator des Heliumatoms zeitunabhängig. Von Interesse ist also die Lösung der zeitunabhängigen, komplex skalierten Schrödingergleichung

$$\hat{\mathrm{H}}_\theta \left|\psi_\mathrm{j}\right\rangle = E_\mathrm{j} \left|\psi_\mathrm{j}\right\rangle \tag{3.1}$$

mit $\hat{\mathrm{H}}_\theta$ als Platzhalter für die in den Gleichungen (2.32) und (2.33) definierten komplex skalierten Hamiltonoperatoren $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(0)}$ und $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(F)}$ und der jeweiligen j-ten Eigenenergie E_j.

Gleichung (3.1) wird durch eine Konfigurationswechselwirkungsrechnung (CI) in einer endlichen Basis $\{|i\rangle\}$ gelöst. Die näherungsweisen Eigenzustände $|\psi\rangle_\mathrm{j}$ ergeben sich als Linearkombinationen der gewählten Basisfunktionen:

$$\left|\psi_\mathrm{j}\right\rangle = \sum_\mathrm{i} c_\mathrm{ij} \left|i\right\rangle \tag{3.2}$$

Zur Berechnung der Eigenenergien E_j und der zugehörigen Koeffizientenmatrix c_ij wurde das Programm TWOSTOE geschrieben, eine Modifikation der Programme TWOSTO und TWOOOS von Prof. Dr. Alejandro Saenz. Ein zentraler Auszug aus TWOSTOE sowie Probleme mit der enthaltenen Diagonalisierungsroutine DIAGMT werden in Anhang B.1 diskutiert. TWOSTOE besitzt verschiedene Routinen zur Orthogonalisierung der Basis; in dieser Arbeit wurde stets die symmetrische Orthogonalisierung gewählt, die mögliche lineare Abhängigkeiten, die im Rahmen der Maschinengenauigkeit bei einer fortwährenden Vergrößerung der Basis auftreten können, *nicht* eliminiert.

3.1.1 Basisfunktionen der Konfigurationswechselwirkung

Als Basisfunktionen $\{|i\rangle\}$ werden fermionische Konfigurationen von wasserstoffartigen *Slater-Type-Orbitals* (STO) $|\Phi_\mathrm{i}\rangle$ als *Einteilchen*basisfunktionen verwendet, also

$$\left|i\right\rangle = \left|\mathrm{Ort}_\mathrm{i}^{\pm}\right\rangle \otimes \left|\mathrm{Spin}^{\mp}\right\rangle \quad , \tag{3.3}$$

wobei $|\mathrm{Spin}^{\mp}\rangle$ einen Singulett- bzw. Triplettzustand des Spins bezeichnet, und

$$\left|\mathrm{Ort}_\mathrm{i}^{\pm}\right\rangle = \left(\left|\Phi_{\mathrm{p_i}}\right\rangle \otimes \left|\Phi_{\mathrm{q_i}}\right\rangle \pm \left|\Phi_{\mathrm{q_i}}\right\rangle \otimes \left|\Phi_{\mathrm{p_i}}\right\rangle\right) \tag{3.4}$$

ist, mit den Einteilchen-STO

$$|\Phi_\mathrm{i}\rangle = |R_\mathrm{i}\rangle \otimes |l_\mathrm{i} m_\mathrm{i}\rangle \quad , \tag{3.5}$$

wobei $|l_\mathrm{i} m_\mathrm{i}\rangle$ als Winkelanteil die jeweilige Kugelflächenfunktion mit Drehimpulsquantenzahl l_i und magnetischer Quantenzahl m_i ist, und der Radialteil $|R_\mathrm{i}\rangle$ in Ortsdarstellung

$$\langle r|R_\mathrm{i}\rangle = (2\zeta_\mathrm{i})^{n_\mathrm{i}} \sqrt{\frac{2\zeta_\mathrm{i}}{(2n_\mathrm{i})!}} r^{n_\mathrm{i}-1} \exp(-\zeta_\mathrm{i} r) \tag{3.6}$$

lautet. Ein Beispiel einer verwendeten Einteilchenbasis ist in Anhang C aufgeführt.

3.1.1.1 Symmetrieauswahl der Konfigurationen

TWOSTOE verwendet für die CI alle aus der Einteilchenbasis bildbaren Konfigurationen, die die gewünschte Symmetrie bezüglich Spin und Bahndrehimpuls besitzen:

Spin Da bei allen Rechnungen die Spin-Bahn-Kopplung vernachlässigt wird, „wirkt" keiner der betrachteten Hamiltonoperatoren auf den Spinanteil der Basisfunktionen (Gleichung (3.3)), weshalb Matrixelemente zwischen Basisfunktionen verschiedener Spinsymmetrie immer verschwinden. Daher wird die Rechnung mit Basisfunktionen fest gewählter Spinsymmetrie durchgeführt. Weil der interessierende Grundzustand des Heliumatoms ohne Feld Singulettsymmetrie besitzt, wird die Rechnung für diese Symmetrie durchgeführt. Nach Anschalten des Feldes verschwindet die Übergangswahrscheinlichkeit in Zustände anderer Symmetrie aufgrund des eben genannten Arguments ebenso, sodass das System in dieser Betrachtung auch dann seine Spinsymmetrie erhält. Die zeitliche Entwicklung des Grundzustandes kann also durch festes Wählen der Singulettsymmetrie und Reduktion der Basis auf Konfigurationen des entsprechend symmetrisierten Ortsanteils $|\mathrm{Ort}\rangle_\mathrm{i}^+$ analysiert werden.

Bahndrehimpuls Da die Einteilchenwellenfunktion

$$|\Phi_\mathrm{i}\rangle = |R_\mathrm{i}\rangle \otimes |l_\mathrm{i} m_\mathrm{i}\rangle \tag{3.7}$$

bereits Eigenzustand zu den Einteilchendrehimpulsoperatoren $\hat{\mathrm{L}}_\mathrm{i}^2$ und $\hat{\mathrm{L}}_{\mathrm{z,i}}$ mit den Eigenwerten $l_\mathrm{i}(l_\mathrm{i}+1)$ und m_i ist, lässt sich der Ortsanteil $|\mathrm{Ort}_\mathrm{i}^\pm\rangle$ in der gekoppelten Eigenbasis der Drehimpulse $\hat{\mathrm{J}}^2$, $\hat{\mathrm{J}}_\mathrm{z}$, $\hat{\mathrm{L}}_1^2$ und $\hat{\mathrm{L}}_2^2$ mit $\hat{\vec{\mathrm{J}}} = \hat{\vec{\mathrm{L}}}_1 + \hat{\vec{\mathrm{L}}}_1$ wie folgt darstellen:

$$|\mathrm{Ort}_\mathrm{i}^\pm\rangle = (|R_{\mathrm{p_i}} R_{\mathrm{q_i}}\rangle \otimes |l_{\mathrm{p_i}} l_{\mathrm{q_i}}\rangle \pm |R_{\mathrm{q_i}} R_{\mathrm{p_i}}\rangle \otimes |l_{\mathrm{q_i}} l_{\mathrm{p_i}}\rangle) \otimes \left(\sum_{\mathrm{JM}} C^{JM}_{\mathrm{l_{p_i} m_{p_i} l_{q_i} m_{q_i}}} |JM\rangle \right) \tag{3.8}$$

Dabei ist $|l_{\mathrm{p_i}} l_{\mathrm{q_i}}\rangle$ der Eigenzustand von $\hat{\mathrm{L}}_1^2$ und $\hat{\mathrm{L}}_2^2$ mit den Eigenwerten $l_{\mathrm{p_i}}(l_{\mathrm{p_i}}+1)$ und $l_{\mathrm{q_i}}(l_{\mathrm{q_i}}+1)$, und $|JM\rangle$ der Eigenzustand von $\hat{\mathrm{J}}^2$ und $\hat{\mathrm{J}}_\mathrm{z}$ mit den Eigenwerten $J(J+1)$) und M. Die $C^{JM}_{\mathrm{l_{p_i} m_{p_i} l_{q_i} m_{q_i}}}$ sind die Clebsch-Gordan-Koeffizienten.

TWOSTOE wählt für die CI aus allen Konfigurationen korrekter Spin-Symmetrie nur solche Konfigurationen aus, für die der Clebsch-Gordan-Koeffizient

$$C^{J_0 M_0}_{\mathrm{l_{p_i} m_{p_i} l_{q_i} m_{q_i}}} \tag{3.9}$$

nicht verschwindet. J_0 und M_0 können hierbei vom Benutzer gewählt werden.

Die letztlich verwendeten Konfigurationen sind also Eigenzustände bezüglich M mit Eigenwert M_0, aber Mischzustände bezüglich J. Im Falle der feldfreien Hamiltonmatrix $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(0)}$ hat die Selektion nach Gleichung (3.9) zusätzlich zur Folge, dass alle in dieser Basis gefundenen Eigenzustände von $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(0)}$ die korrekte Symmetrie besitzen, also Eigenzustände zu $\hat{\mathrm{J}}^2$ und $\hat{\mathrm{J}}_\mathrm{z}$ mit den Eigenwerten $J_0(J_0+1)$ und M_0 sind. Der Grund hierfür wird in Anhang A erläutert.

3.1.1.2 Diskussion zur Einschränkung der M-Symmetrie auf $M = 0$

Da in dieser Arbeit die zeitliche Entwicklung des Grundzustandes betrachtet wird, und dieser kugelsymmetrisch ist, kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit das zum Zeitpunkt $t = 0$ eingeschaltete elektrische Feld entlang der z-Achse gewählt werden. Einerseits bedeutet das, dass zu $t = 0$ kein Übergang in Zustände mit $M \neq 0$ stattfindet, und andererseits, dass die interessierenden Zustände mit $M = 0$ nicht durch Basisfunktionen beschrieben werden, die nicht $M = 0$ - Symmetrie besitzen. Grundsätzlich wird also bei allen Rechnungen $M = 0$ gewählt.

3.1.2 Analyse der θ-Trajektorien

Ist in den Spektren der Hamiltonoperatoren im Feld bei verschiedenen Skalierungswinkeln θ eine Resonanz der Energie $E_\mathrm{res}(\theta)$ identifiziert, lässt sich der ideale Skalierungswinkel θ_id durch die Bedingung, dass für θ_id die Ableitung

$$\left.\frac{\mathrm{d}|E_\mathrm{res}(\theta)|}{\mathrm{d}\theta}\right|_{\theta_\mathrm{id}}$$

der θ-Trajektorie $E_\mathrm{res}(\theta)$ minimal wird, bestimmen. Für diesen Zweck wird das Programm TRAJECTORY_ANALYSIS von Prof. Dr. Alejandro Saenz verwendet.

3.2 Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung

Betrachtet sei ein feldfreies Heliumatom, das sich zur Zeit $t < 0$ im Grundzustand befindet. Zum Zeitpunkt $t = 0$ werde das Heliumatom einem zeitlich konstanten und homogenen Feld — letzteres gilt in Dipolnäherung — der Feldstärke $\mathcal{E}$ und der Länge T ausgesetzt. Der Nomenklatur von Gleichung (2.20) folgend lässt sich dies durch

$$\vec{\mathcal{E}}(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ \mathcal{E}\vec{e}_\mathrm{z} & 0 \leq t \leq T \\ 0 & t > T \end{cases} \tag{3.10}$$

beschreiben.

3.2.1 Näherung des plötzlichen Anschaltens

Die Näherung des plötzlichen Anschaltens (sudden approximation) wird insbesondere im Zusammenhang mit der Methode der komplexen Skalierung in [14] beschrieben. Geschieht der Anschalt- bzw. Ausschaltvorgang schnell im Vergleich zur typischen

Reaktionszeit der Wellenfunktion des Ausgangszustandes, kann angenommen werden, dass die Wellenfunktion durch den Anschaltvorgang selbst unverändert bleibt, also diabatisch auf die Störung reagiert. Daher kann in diesem Grenzfall die Besetzung der Zustände des Systems im Feld durch Entwicklung des Ausgangszustandes in den Eigenfunktionen des Hamiltonoperators im Feld erhalten werden, also durch *Projektion* des feldfreien Zustandes in die Eigenbasis des Hamiltonoperators im Feld. Die mathematische Umsetzung dieser Projektion wird in Abschnitt 3.2.1.2 beschrieben. Der Hamiltonoperator im Feld besitzt keine diskreten Eigenenergien mehr, sondern ein kontinuierliches Spektrum. Die kontinuierliche Übergangswahrscheinlichkeitsdichte $\frac{\mathrm{d}P(E)}{\mathrm{d}E}\mathrm{d}E$ ist die Wahrscheinlichkeit, das System sofort nach Anschalten des Feldes im Intervall $[E, E + \mathrm{d}E]$ zu finden.

Im durch Gleichung (3.10) beschriebenen und in dieser Arbeit behandelten Fall des instantanen Anschaltvorganges ist die Annahme, dass die Wellenfunktion durch den Anschaltvorgang unverändert bleibt, natürlich gerechtfertigt. Als näherungsweise Annahme ist sie aber auch anwendbar bei realistischen Systemen, solange der Anschaltvorgang hinreichend schnell geschieht.

3.2.1.1 Feldfreier Grundzustand: $t < 0$

Wie in Kapitel 3.1 beschrieben, wird die Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung im feldfreien Fall

$$\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(0)} \left|\psi_\mathrm{j}^{(0)}\right\rangle = E_\mathrm{j}^{(0)} \left|\psi_\mathrm{j}^{(0)}\right\rangle \tag{3.11}$$

durch das Programm TWOSTOE in endlicher Basis $\{|i\rangle\}$ bestimmt. Insbesondere ist dabei der feldfreie Grundzustand $|\psi_0^{(0)}\rangle$ für die weiteren Rechnungen von Interesse. Dieser lautet

$$\left|\psi_0^{(0)}\right\rangle = \sum_\mathrm{i} c_{\mathrm{i}0}^{(0)} \left|i\right\rangle \quad . \tag{3.12}$$

Die Zeitabhängigkeit des Grundzustandes während $t < 0$ beschränkt sich auf einen unwesentlichen Phasenfaktor.

Betrachtet sei nun die zeitliche Entwicklung der Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung $|\Psi(t)\rangle$ für $t \geq 0$ mit der Startbedingung

$$\left|\Psi(t=0)\right\rangle = \left|\psi_0^{(0)}\right\rangle \quad . \tag{3.13}$$

3.2.1.2 Plötzliches Anschalten: $t = 0$

In der Näherung des plötzlichen Anschaltens bleibt der Zustand beim Anschaltvorgang diabatisch unverändert. Für die Berechnung der weiteren Zeitentwicklung ist also die Entwicklung des zu $t = 0$ vorliegenden, feldfreien Grundzustandes $|\Psi(t = 0)\rangle$ in den Eigenzuständen des Hamiltonoperators im Feld, also den Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

$$\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(F)} \left|\psi_\mathrm{j}^{(F)}\right\rangle = E_\mathrm{j}^{(F)} \left|\psi_\mathrm{j}^{(F)}\right\rangle \tag{3.14}$$

im Feld der Feldstärke $\mathcal{E}$ nötig. Diese werden wieder durch TWOSTOE in endlicher Basis $\{|i\rangle\}$ berechnet,

$$\left|\psi_\mathrm{j}^{(F)}\right\rangle = \sum_\mathrm{i} c_\mathrm{ij}^{(F)} \left|i\right\rangle \quad . \tag{3.15}$$

Da die Eigenvektoren der Hamiltonmatrizen von $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(0)}$ und $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(F)}$ aufgrund der komplexen Skalierung nicht orthonormal, sondern biorthonormal sind, erfolgt die Entwicklung nach dem biorthonormalen Skalarprodukt

$$|\Psi(t=0)\rangle = \sum_{\mathrm{i}} \alpha_{\mathrm{i}0} \, |\psi_{\mathrm{i}}^{(F)}\rangle \tag{3.16}$$

mit

$$\alpha_{\mathrm{i}0} = \sum_{\mathrm{k}} c_{\mathrm{ki}}^{(F)} c_{\mathrm{k}0}^{(0)} \quad , \tag{3.17}$$

wobei $c_{\mathrm{ki}}^{(F)}$ *nicht* komplex konjugiert auftritt. Zur Berechnung der Koeffizientenmatrix α_{ij} wurde die Routine PROJECTION (siehe Anhang B.2) geschrieben.

Übergangswahrscheinlichkeitsdichte Die in Abschnitt 3.2.1 eingeführte Übergangswahrscheinlicheitsdichte $\frac{\mathrm{d}P(E)}{\mathrm{d}E}$ des feldfreien Grundzustandes $|\psi_0^{(0)}\rangle$ kann mithilfe komplexer Skalierung berechnet werden (siehe [14] und [15]). Wie dort begründet, kann $\frac{\mathrm{d}P(E)}{\mathrm{d}E}$ allgemein bei einer plötzlichen Änderung des Hamiltonoperators von $\hat{\mathrm{H}}$ zu $\hat{\mathrm{H}}'$ über den Erwartungswert der Resolvente von $\hat{\mathrm{H}}'$, ausgedrückt werden. Konkret im hier betrachteten Fall kann damit durch Entwicklung von $|\psi_0^{(0)}\rangle$ in den Eigenzuständen $|\psi_{\mathrm{i}}^{(F)}\rangle$ von $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(F)}$ der Ausdruck

$$\frac{\mathrm{d}P(E)}{\mathrm{d}E} = \frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\left(\sum_{\mathrm{i}} \frac{\langle\psi_0^{(0)^*}|\psi_{\mathrm{i}}^{(F)}\rangle \, \langle\psi_{\mathrm{i}}^{(F)^*}|\psi_0^{(0)}\rangle}{E_{\mathrm{i}}^{(F)} - E}\right) \tag{3.18}$$

erhalten werden. Der Bra $\langle\psi^*|$ wird dabei aus dem zugehörigen Ket $|\psi\rangle$ erhalten, indem der Winkelanteil von $|\psi\rangle$ komplex konjugiert wird, der Radialteil aber nicht. Ausgedrückt in endlicher Basis führt das auf

$$\frac{\mathrm{d}P(E)}{\mathrm{d}E} = \frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\left(\sum_{\mathrm{i}} \frac{\left(\sum_{\mathrm{k}} c_{\mathrm{k}0}^{(0)} c_{\mathrm{ki}}^{(F)}\right)^2}{E_{\mathrm{i}}^{(F)} - E}\right) \quad . \tag{3.19}$$

Zur Berechnung dieser Größe wurde die MATLAB-Routine TRPROP (siehe Anhang B.3) geschrieben.

3.2.1.3 Propagation im Feld: $0 < t < T$

$|\Psi(t=0)\rangle$ ist kein Eigenzustand von $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(F)}$, daher manifestiert sich für $0 < t < T$ die Zeitpropagation nicht mehr nur in einem trivialen Phasenfaktor. Da aber aufgrund der Zeitunabhängigkeit des Hamiltonoperators sich die Zeitabhängigkeit der zeitabhängigen Schrödingergleichung nach wie vor separieren lässt, erfolgt die Propagation von $|\Psi(t=0)\rangle$ für $0 < t < T$ durch Multiplikation der $|\psi_{\mathrm{i}}^{(F)}\rangle$ mit dem jeweiligen Phasenfaktor $\exp(-iE_{\mathrm{i}}t)$. Damit lässt sich der Zustand zu $t = T$ gemäß

$$|\Psi(t=T)\rangle = \sum_{\mathrm{i}} \beta_{\mathrm{i}0} \, |\psi_{\mathrm{i}}^{(F)}\rangle \tag{3.20}$$

mit

$$\beta_{\mathrm{i}0} = \alpha_{\mathrm{i}0} \cdot \exp(-iE_{\mathrm{i}}T) \tag{3.21}$$

berechnen. Die beteiligten Energien E_{i} können in komplexer Skalierung auch negative Imaginärteile besitzen, was zu einem exponentiellen Abfall der Norm führt.

Behandlung der positiven Imaginärteile Wie in Abschnitt 2.2.3 bereits erwähnt, und wie sich bei den Ergebnissen in 4.1.2.1 auch tatsächlich zeigen wird, treten bei der Diagonalisierung des Hamiltonoperators im Feld unphysikalische Zustände mit positivem Imaginärteil auf. Bei der Zeitpropagation nach Gleichung (3.20) führen diese zur Divergenz der Zustandsnorm, was das Ergebnis unbrauchbar macht.

Um diesem Problem zu begegnen, werden die Koeffizienten β_{i0} nach der Propagation (vgl. Gleichung (3.21)) zu Null gesetzt. Diese Vorgehensweise ist rigoros nicht zu begründen, aber heuristisch zu motivieren: Das Nullsetzen der entsprechenden β_{i0} entspricht der nähernden Annahme, dass solche Zustände schon nach beliebig kurzer Zeit vollständig ionisiert sind. Da davon ausgegangen werden muss, dass der positive Imaginärteil vollkommen unphysikalisch ist, kann über die Lebensdauer dieser Zustände aus dem Spektrum keine Information gewonnen werden, außer die Feststellung, dass die Zustände mit positivem Imaginärteil typischerweise im Bereich recht hoher Realteile liegen (siehe Abbildung 4.1.2.1). Dies lässt den Schluss zu, dass sie eine kurze Lebensdauer besitzen. Diese qualitative Aussage durch Ansetzen einer endlichen Lebensdauer quantitativ zu verfeinern, wäre willkürlich. Daher wird angenommen, dass die Lebensdauer verschwindet. Zudem lässt sich feststellen, dass die zu diesen Zuständen gehörenden Koeffizienten zumindest bei den in dieser Arbeit betrachteten Feldstärken in der Größenordnung 10^{-3} liegen.

Die Propagation, also die Berechnung der β_{ij}, wird mit dem MATLAB-Skript ONOFF durchgeführt, das im Anhang B.4 aufgeführt ist.

3.2.1.4 Plötzliches Ausschalten: $t = T$

Analog zu dem in Abschnitt 3.2.1.2 beschriebenen Anschaltvorgang bleibt auch beim Ausschaltvorgang der Zustand unverändert, und es erfolgt eine Rückprojektion, also eine Entwicklung des Zustandes $|\Psi(t=T)\rangle$ in den Eigenzuständen $\{|\psi_j^{(0)}\rangle\}$ von $\hat{H}_\theta^{(0)}$,

$$|\Psi(t=T)\rangle = \sum_i \gamma_{i0} \, |\psi_i^{(0)}\rangle \tag{3.22}$$

mit

$$\gamma_{i0} = \sum_k \alpha_{ki} \beta_{k0} \quad , \tag{3.23}$$

um die weitere Zeitentwicklung berechnen zu können. Dieser Schritt wird auch mit dem Skript im Anhang B.4 durchgeführt

3.2.2 Bestimmung der Ionisationswahrscheinlichkeit bei endlicher Pulslänge

Aus $|\Psi(t=T)\rangle$ ist es nun möglich, die Ionisationswahrscheinlichkeit des Heliumatoms durch den Puls zu bestimmen. Die Ionisationswahrscheinlichkeit ist die Wahrscheinlichkeit, dass für $t \to \infty$ die Einteilchendichte mindestens eines Elektrons innerhalb eines beliebig großen Radius' um das Atom verschwindet. Im Grenzwert $t \to \infty$ werden nur solche Anteile des Wellenpaketes das Atom nicht verlassen haben, die in der Darstellung aus Gleichung (3.22) zu gebundenen Eigenzuständen gehören. Daher beträgt die Ionisationswahrscheinlichkeit (siehe auch [9])

$$P_{\text{ion}} = 1 - \sum_{\text{i: gebunden}} |\gamma_{i0}|^2 \quad , \tag{3.24}$$

wobei die Summe über all jene Koeffzienten γ_{i0} laufen soll, für die die zugehörigen $|\psi_i^{(0)}\rangle$ gebundene Zustände sind. Da die Grundzustandsenergie eines He^+-Ions -2 beträgt, ist also die Schwellenenergie, ab der ein Zustand nicht mehr für alle Zeiten gebunden ist, -2. Niedrigere Energien gehören zu gebundenen Zuständen, daher verschwindet auch in komplexer Skalierung ihr Imaginärteil. Gleichung (3.24) lässt sich damit umformulieren zu

$$P_{\text{ion}} = 1 - \sum_{i:\text{Re}(E_i)<-2} |\gamma_{i0}|^2 \quad . \tag{3.25}$$

Für die Berechnung der Ionisationswahrscheinlichkeit wird ebenfalls das MATLAB-Skript ONOFF verwendet.

Kapitel 4

Ergebnisse

4.1 Lösung der zeitunabhängigen Schrödingergleichung

4.1.1 Feldfreie Spektren

Durch Konfigurationswechselwirkungsrechnung wird die zeitunabhängige Schrödingergleichung gelöst, es werden also in endlicher Basis die Eigenwerte und Eigenvektoren der Matrixdarstellung von $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(0)}$ durch TWOSTOE gesucht. Als Symmetrieadaptierung (siehe Abschnitt 3.1.1.1 zur Nomenklatur) wird bezüglich des Spins Singulettsymmetrie, außerdem $M = 0$ und für J alle Werte zwischen 0 und einem jeweils gewählten $J_{\max}$ gewählt. Zwar besitzt der in dieser Arbeit untersuchte feldfreie Grundzustand die Symmetrie $J = 0$, aber durch den zeitabhängigen Hamiltonoperator ist das nach Anschalten des Feldes nicht mehr der Fall. Daher muss die Wahl der Basis gewährleisten, dass auch Zustände anderer Symmetrie beschrieben werden können. Der Skalierungswinkel θ der komplexen Skalierung wird zwischen 0° und 45° variiert. Zusätzlich wird die Größe der zugrundeliegenden Einteilchenbasis variiert.

4.1.1.1 Charakteristika des Spektrums

Abbildung 4.1 zeigt einen direkten Vergleich zwischen Ausschnitten der für $\theta = 0°$ und für $\theta = 22°$ erhaltenen Spektra. Durch die komplexe Skalierung werden Kontinua mit Schwellen bei $\mathrm{Re}(E) = -2$ und um $\mathrm{Re}(E) = 0$ herum sichtbar. Die Energie -2 ist die Grundzustandsenergie eines He^+-Ions, das von dieser Schwelle ausgehende Kontinuum ist also das Kontinuum der einfachen Ionisation, wobei das He^+-Ion im Grundzustand verbleibt. Hin zu höheren Energien befinden sich die Schwellenenergien für die Einelektronenionisation mit angeregtem He^+-Ion, 0 ist die Schwellenenergie für die Ionisation beider Elektronen. Die Eigenenergien der zugehörigen Kontinua bilden Strahlen in der komplexen Ebene, die bei der jeweiligen Schwellenenergie beginnen und um -2θ in die untere Halbebene gekippt sind.

4.1.1.2 Konvergenz der Grundzustandsenergie

Eine gute Möglichkeit, die Konvergenz der Basis zu überprüfen, bietet die Betrachtung der Energie des Grundzustandes, die sehr genau bekannt ist. Tabelle 4.1 vergleicht die für $\theta = 0°$ gefundenen Grundzustandsenergien verschiedener Einteilchenbasissätze unter Verwendung verschiedener $J_{\max}$ mit dem numerisch errechneten

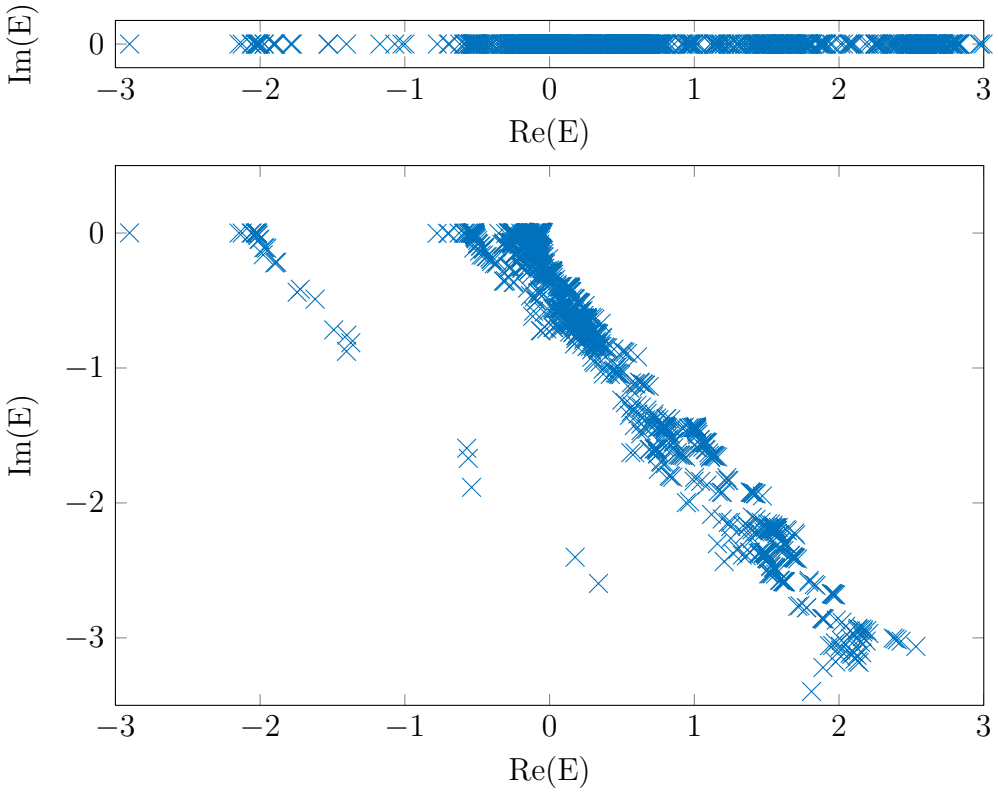

Abbildung 4.1: Feldfreies Spektrum unter Verwendung der Einteilchenbasis *07* mit $J_{\max} = 8$: Skalierungswinkel $\theta = 0°$ oben und $\theta = 22°$ unten.

Wert für die nichtrelativistische Grundzustandsenergie von Helium aus [16]. Dort wurde ebenfalls eine Konfigurationswelchselwirkungsrechnung, jedoch mit — im Gegensatz zu dem hier verwendeten Basissatz — explizit korrelierten *Slater-Type-Orbitals* durchgeführt. Die Hinzunahme von Konfigurationen, deren Winkelanteil $J = 0$ nicht enthält, verschlechtert das Ergebnis leicht. Diese Konfigurationen tragen nicht zur besseren Beschreibung des Grundzustandes bei, und vergrößern somit lediglich die Hamilton- bzw. Überlappmatrix, was zu numerischen Fehlern führt. Wie in 4.1.1 erläutert, werden diese Konfigurationen trotzdem für die Beschreibung der weiteren Zeitpropagation benötigt. Eine Vergrößerung der Einteilchenbasis allerdings, und eine damit einhergehende Vergrößerung der Zahl der Konfigurationen, die $J = 0$ enthalten, verbessert das Ergebnis signifikant.

Der Literaturwert [16] wird trotzdem von allen getesteten Basissätzen nur bis auf

Basis	$J_{\max}$	# Konf.	Wert	rel. Abw. zu Lit.	zu bestem Erg.
07	8	1396	-2.901850917	$6.5 \cdot 10^{-4}$	$1.3 \cdot 10^{-7}$
07	0	520	-2.901850919	$6.5 \cdot 10^{-4}$	$1.3 \cdot 10^{-7}$
01	8	2326	-2.901851308	$6.5 \cdot 10^{-4}$	$6 \cdot 10^{-10}$
01	0	631	-2.901851310	$6.5 \cdot 10^{-4}$	0
aus [16]			-2.9037243770341		

Tabelle 4.1: Vergleich der mit verschiedenen Basissätzen erhaltenen Grundzustände bei $\theta = 0°$: Die Einteilchenbasis *07* besteht aus 120, die Einteilchenbasis *01* aus 192 Funktionen.

$6.5 \cdot 10^{-4}$ relative Abweichung erreicht. Das könnte vor allem daran liegen, dass in der hier vorgestellten Rechnung im Gegensatz zu der in [16] ein unendlich schwerer Kern angenommen wird. Der Massenpolarisierungsterm (siehe Gleichung (2.4)) wird also vernachlässigt, und um die Näherung konsistent zu halten, wird auch die reduzierte Masse $\mu = \frac{M}{1+M}$ (M bezeichnet die Kernmasse) auf 1 gesetzt. Die Größenordnung der durch diese Näherung verursachten Abweichung lässt sich also durch die relative Abweichung des tatsächlichen μ von 1 abschätzen, und diese liegt tatsächlich in der Größenordnung von 10^{-4}.

4.1.2 Spektren im Feld

In gleicher Weise wird der Hamiltonoperator im Feld $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(F)}$ in endlicher Basis diagonalisiert. Die Rechnung wird für verschiedene Feldstärken zwischen $\mathcal{E} = 0.1$ und $\mathcal{E} = 2$ durchgeführt. Als Symmetrieadaptierung (siehe Abschnitt 3.1.1.1 zur Nomenklatur) wird bezüglich des Spins Singulettsymmetrie, $M = 0$ und für J alle Werte zwischen 0 und einem jeweils gewählten $J_{\max}$ gewählt. Da der Impulsoperator $\hat{\mathrm{J}}^2$ nicht mit $\hat{\mathrm{H}}_\theta^{(F)}$ vertauscht, werden Konfigurationen aller J-Symmetrien schon zur Beschreibung des Grundzustandes benötigt. Der Skalierungswinkel θ der komplexen Skalierung wird auch hier zwischen 0° und 45° variiert.

4.1.2.1 Charakteristika des Spektrums

Abbildung 4.2 zeigt einen direkten Vergleich von Ausschnitten der für die Feldstärke $\mathcal{E} = 0.2$ für $\theta = 0°$ und für $\theta = 19°$ erhaltenen Spektra. Das unskalierte Spektrum

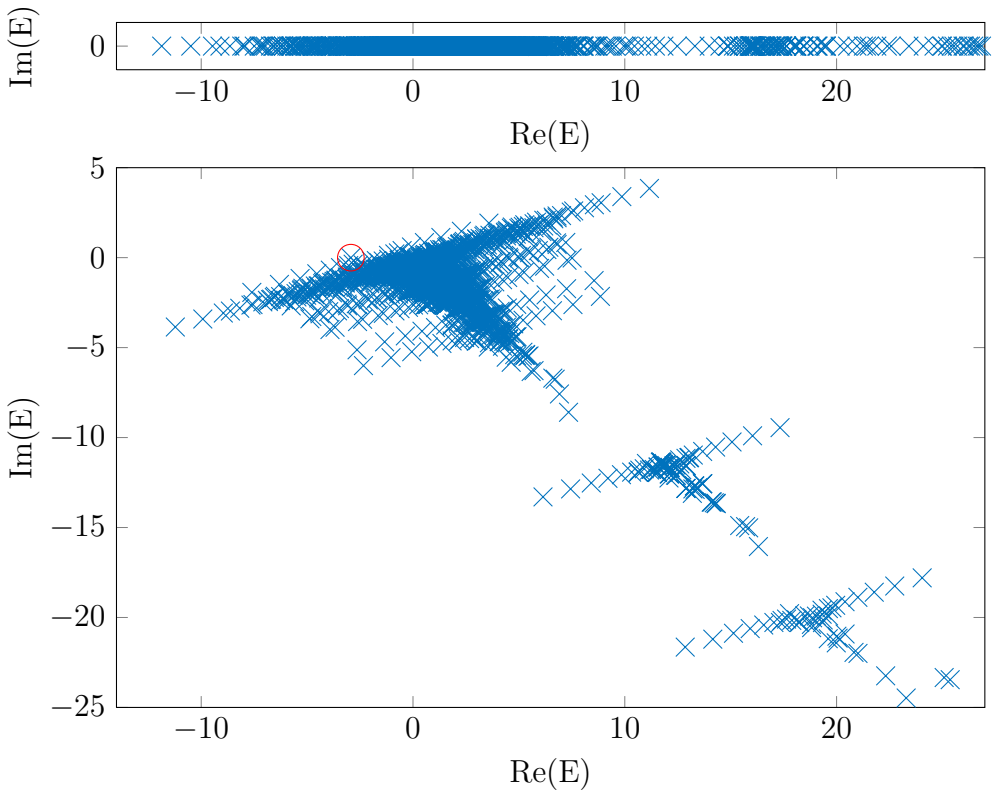

Abbildung 4.2: Spektrum im Feld mit $\mathcal{E} = 0.2$ unter Verwendung der Einteilchenbasis *01* mit $J_{\max} = 8$: Skalierungswinkel $\theta = 0°$ oben und $\theta = 19°$ unten. Die Grundzustandsresonanz ist umkreist.

ist nun nach unten auf der reellen Achse nur durch die endliche Basis beschränkt, da das Potential nach unten nicht beschränkt ist. Im skalierten Spektrum ist ein am Ursprung um den Winkel θ verkipptes Band an Eigenwerten zu erkennen, sowie ein weiteres, das um den Winkel -2θ verkippt ist. Wie in Abschnitt 2.2.3 diskutiert, sind die positiven Imaginärteile eine Folge davon, dass der Dipoloperator nicht dilatationsanalytisch ist. Die Energie der Grundzustandsresonanz, in Abbildung 4.2 umkreist, besitzt einen signifikanten negativen Imaginärteil, der im folgenden Abschnitt noch genauer untersucht wird.

4.1.2.2 θ-Trajektorien der Grundzustandsresonanz

Die Grundzustandsresonanz soll nun genauer betrachtet werden. Die θ-Trajektorie der Energie der Grundzustandsresonanz wird mit dem Programm TRAJECTORY_ANALYSIS untersucht. Die θ-Trajektorie für $\mathcal{E} = 0.2$ ist in Abbildung 4.3 dargestellt. Der stabilste Punkt ist bei $\theta_{\text{id}} = 19°$ erreicht; die beste Näherung für die Energie

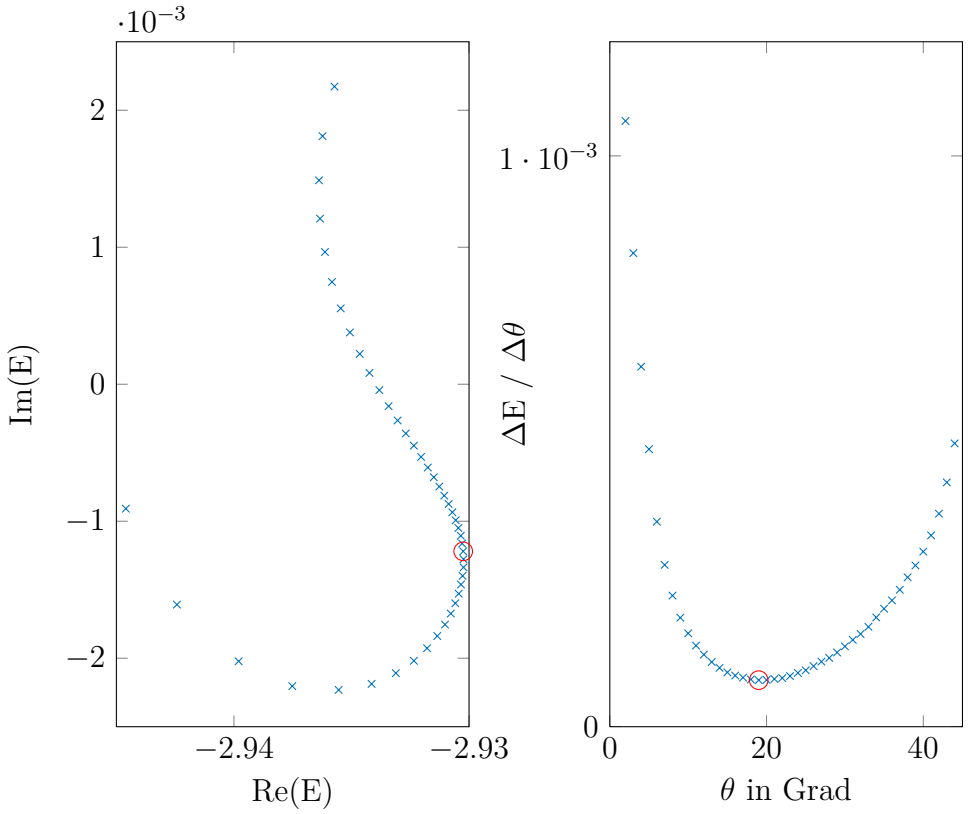

Abbildung 4.3: Trajektorie der Grundzustandsresonanz $E_{\text{res}}(\theta)$ (links) und die Ableitung $\frac{\mathrm{d}|E_{\text{res}}(\theta)|}{\mathrm{d}\theta}$ (rechts) bei $\mathcal{E} = 0.2$ unter Verwendung der Einteilchenasis *01* mit $J_{\text{max}} = 8$: Der stabilste Punkt ist umkreist und liegt bei $\theta_{\text{id}} = 19°$.

der Grundzustandsresonanz ist daher die Energie, die für $\theta_{\text{id}} = 19°$ gefunden wurde.

Weil der feldfreie Grundzustand nach Anschalten des Feldes vor allem auf die Grundzustandsresonanz projiziert wird (siehe Abschnitt 4.1.3), kann davon ausgegangen werden, dass bei allen weiterführenden Rechnungen (Ionisationswahrscheinlichkeit etc.) das am besten konvergierte Ergebnis erhalten wird, wenn der Skalierungswinkel θ_{id} gewählt wird, der die Grundzustandsresonanz im jeweiligen Feld am besten beschreibt. Für alle verwendeten Feldstärken wird also zunächst das ideale θ_{id} bestimmt, und mit dieser Wahl dann weitere Rechnungen durchgeführt.

4.1.2.3 Konvergenz der Grundzustandsresonanzen

Referenzwerte für die Halbwertsbreiten

$$\Gamma = -2 \cdot \mathrm{Im}(E_{\mathrm{res}}) \tag{4.1}$$

der Grundzustandsresonanzen E_{res} verschiedener Feldstärken finden sich in [17]. Diese wurden ebenfalls in komplexer Skalierung mithilfe einer Konfigurationswechselwirkungsrechnung, allerfings mit explizit korrelierten Basisfunktionen erhalten. Abbildung 4.4 vergleicht die gefundenen Werte für verschiedene Basissätze mit denen aus [17]. Zur Basisabhängigkeit der Ergebnisse in 4.4 lässt sich folgendes feststellen:

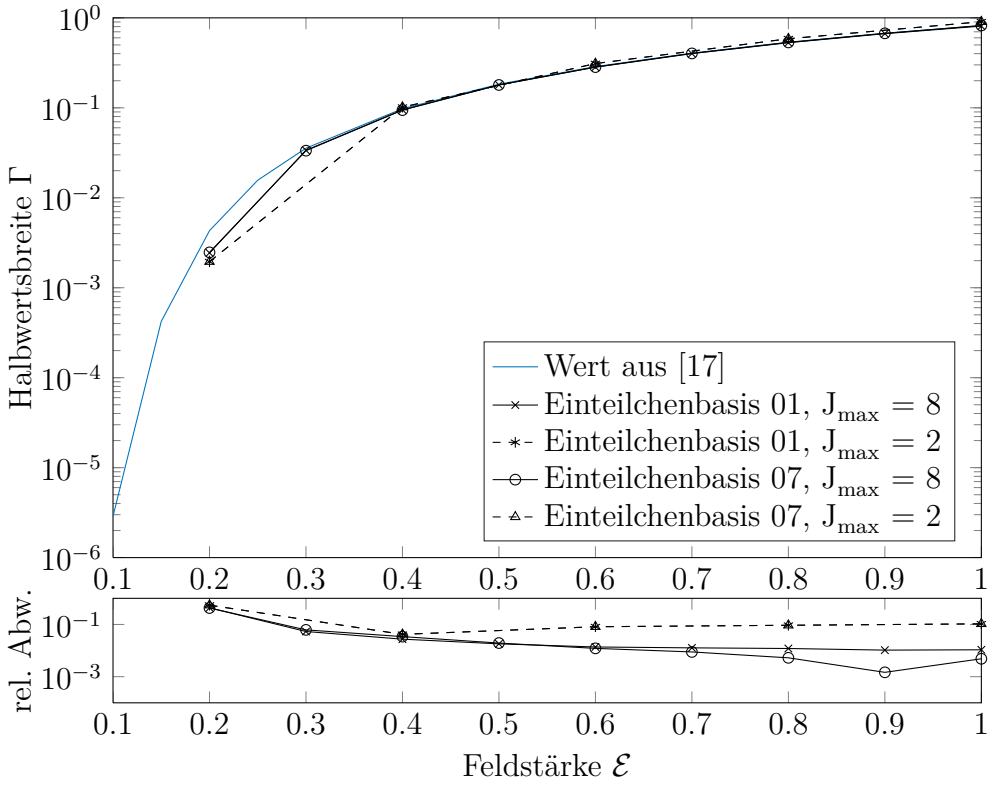

Abbildung 4.4: Vergleich der Halbwertsbreiten aus [17] mit den durch TWOSTOE in verschiedenen Basissätzen errechneten. Die Einteilchenbasis *07* besteht aus 120, die Einteilchenbasis *01* aus 192 Funktionen.

Erstens ist deutlich erkennbar, dass die Lösung mit steigendem J_{max} genauer wird. Der beschriebene Resonanzzustand ist nun ein Mischzustand verschiedener J, daher wird die Beschreibung besser, wenn die Basis um Funktionen, die nur höhere J enthalten, erweitert wird. Andererseits führt eine Vergrößerung der Einteilchenbasis bei festgehaltener J-Auswahl letzendlich auch zu schlechteren Ergebnissen. Hier werden also numerische Effekte sichtbar. Bei Vergrößerung von J_{max} scheint dieser Effekt nicht zu dominieren.

Auch bei geeigneter Basiswahl ist es für geringere Feldstärken als $\mathcal{E} = 0.17$ mit der hier diskutierten Methode nicht möglich, die Halbwertsbreite der Resonanz festzustellen, weil der Wert bei diesen Feldstärken so nahe bei 0 liegt, dass die θ-Trajektorie nicht mehr konvergiert. Der relative Fehler der Beschreibung der Grundzustandsresonanz fällt erst für Feldstärken ab 0.6 auf unter 1%. Die Feldstärke 1 entspricht dabei in SI-Einheiten in etwa $5 \times 10^{11}\,\mathrm{V\,m^{-1}}$; die Intensität einer ebene Welle dieser Feldstärkenamplitude beträgt ungefähr $3 \times 10^{16}\,\mathrm{W/cm^2}$.

4.1.3 Übergangswahrscheinlichkeitsdichte

Die Übergangswahrscheinlichkeitsdichte des Grundzustandes in die Zustände im Feld kann nach Gleichung (3.19) berechnet werden. Die Ergebnisse sind für verschiedene Feldstärken in Abbildung 4.5 dargestellt Der Peak der Grundzustandsresonanz

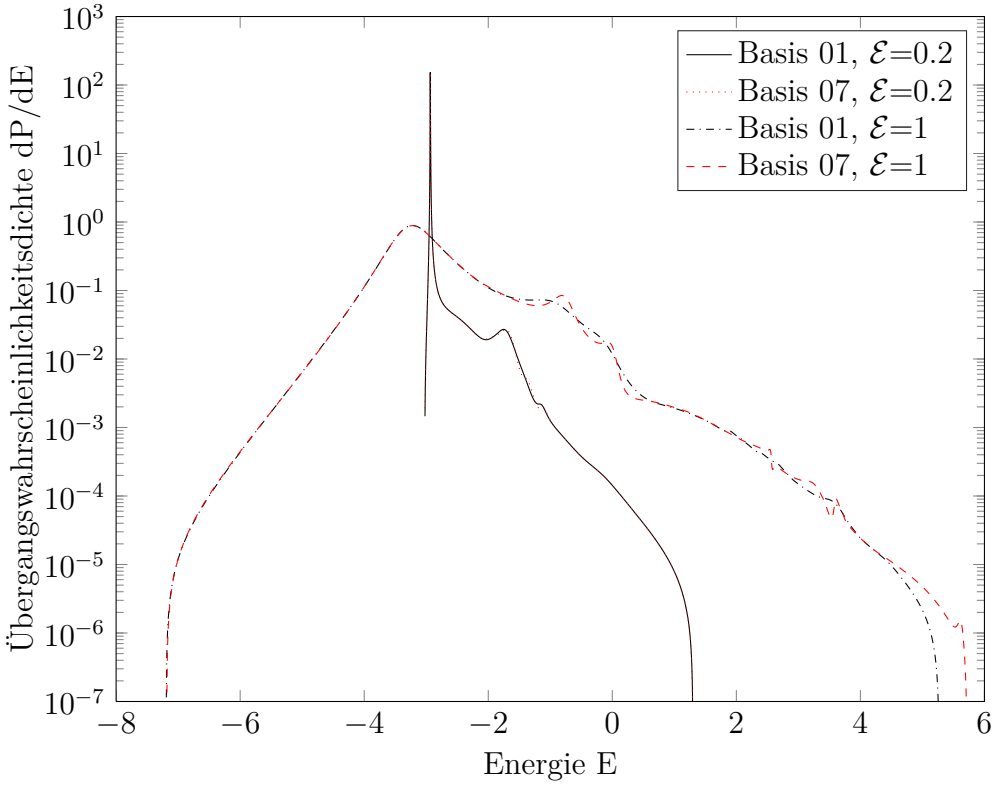

Abbildung 4.5: Übergangswahrscheinlichkeitsdichten für verschiedene Feldstärken, bei $J_{\max} = 8$, aber unter Verwendung verschiedener Einteilchenbasen. Die beiden Kurven bei $\mathcal{E} = 0.2$ sind kaum zu unterscheiden. Die Einteilchenbasis *07* besteht aus 120, die Einteilchenbasis *01* aus 192 Funktionen.

verbreitert sich mit zunehmender Feldstärke, das Peakmaximum verschiebt sich außerdem hin zu kleineren Energien (Stark-Verschiebung). Bei kleineren Feldstärken ist ein Nebenpeak bei höheren Energien zu beobachten, bei größeren Feldstärken sind aufgrund der Verbreiterung die Peaks nicht mehr voneinander zu trennen. Außerdem ist erkennbar, dass sich für Zustände höherer Energien die Beschreibung anhand verschiedener Basissätze offensichtlich unterscheidet; die Kurven weichen signifikant voneinander ab.

4.2 Berechung der Ionisationswahrscheinlichkeit

Die Projektion, Propagation und Rückprojektion der Zustände wird, wie in Abschnitt 3.2.1 beschrieben, mit MATLAB-Skripten durchgeführt. Die Ionisationswahrscheinlichkeit $P_{\text{ion}}(T)$ wird daraus nach Gleichung (3.25) für verschiedene Pulsdauern T berechnet. Die Ergebnisse sind für verschiedene Feldstärken zwischen $\mathcal{E} = 0.2$ und $\mathcal{E} = 1$ in Abbildung 4.6 dargestellt. Die Ionisationswahrscheinlichkeiten steigen monoton, bis sie im Grenzwert großer Pulsdauern den Wert 1 erreichen.

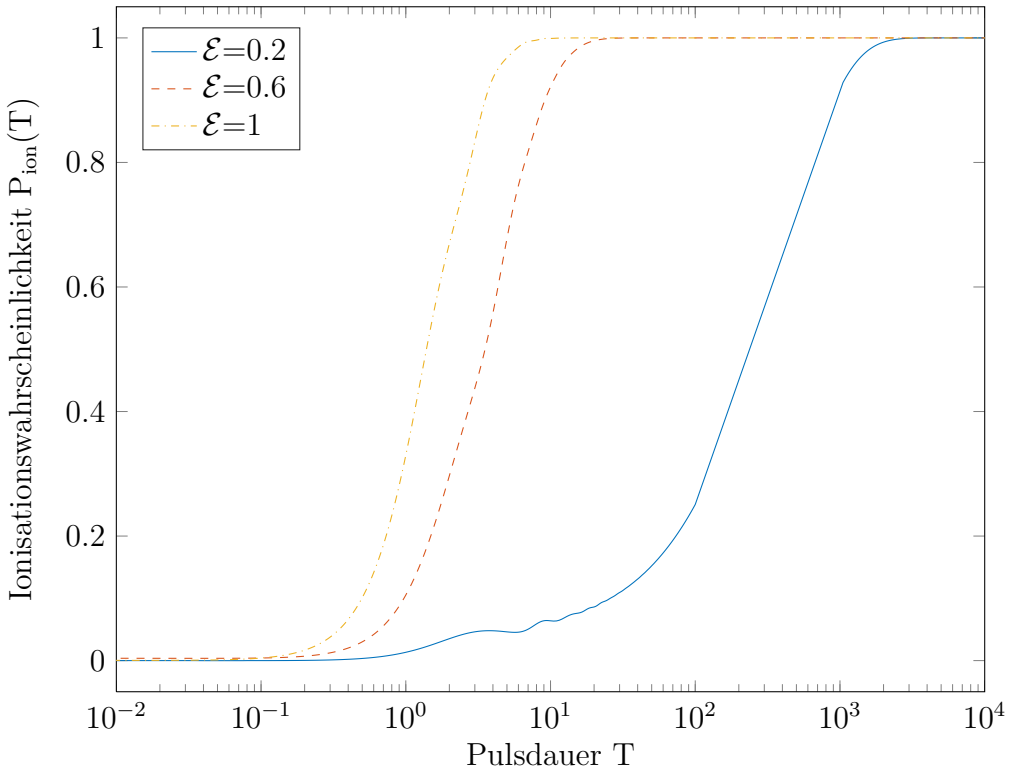

Abbildung 4.6: Ionisationswahrscheinlichkeiten als Funktion der Pulsdauer T bei verschiedenen Feldstärken $\mathcal{E}$. Es wurde die Einteilchenbasis *07* mit $J_{\max} = 8$ verwendet.

4.2.1 Berechnung der Änderung der Ionisationswahrscheinlichkeit

Die genaue Form des Anstiegs lässt sich durch Betrachten der Größe

$$D(T) = -\frac{\frac{\mathrm{d}(1-P_{\mathrm{ion}}(T))}{\mathrm{d}T}}{1-P_{\mathrm{ion}}} \tag{4.2}$$

untersuchen. Diese Größe wird im Folgenden *normierte Änderung* genannt. Der Begriff *Rate*, wenngleich griffiger, wird bewusst vermieden. $D(T)$ ist keine Rate in dem Sinne, dass sie schon während des Pulses als Wahrscheinlichkeitsstrom durch eine geschlossene Fläche um das Heliumatom auftritt. Eine solche Größe ist niemals unabhängig von der Form dieser Fläche, und daher nicht wohldefiniert. Der Begriff der Ionisationswahrscheinlichkeit kann nur im Grenzwert großer Zeiten nach Abschalten des Feldes definiert werden, wie in Abschnitt 3.2.2 geschehen. $D(T)$ gibt die normierte Änderung dieser Wahrscheinlichkeit mit der Pulsdauer an. $D(T)$ ist für verschiedene Feldstärken in Abbildung 4.7 dargestellt.

Numerisch ergibt sich das Problem, dass sich für hinreichend große T der Ausdruck $1 - P_{\mathrm{ion}}(T)$ der 0 annähert. Für größere Feldstärken ist diese Abweichung sehr schnell unterhalb der numerischen Genauigkeit der Rechnung, was den Ausdruck $D(T)$ unkontrollierbar macht. $D(T)$ ist für kleine Pulslängen T stark von T abhängig, nach einer für das Feld charakteristischen Zeit jedoch erreicht $D(T)$ einen konstanten Grenzwert. Da nach Anschalten des Feldes sich ein Großteil der Wellenfunktion in der Grundzustandsresonanz befindet, ist die naive Erwartung, dass der Grenzwert von $D(T)$ für große T sich in etwa dem Wert annähert, der aufgrund

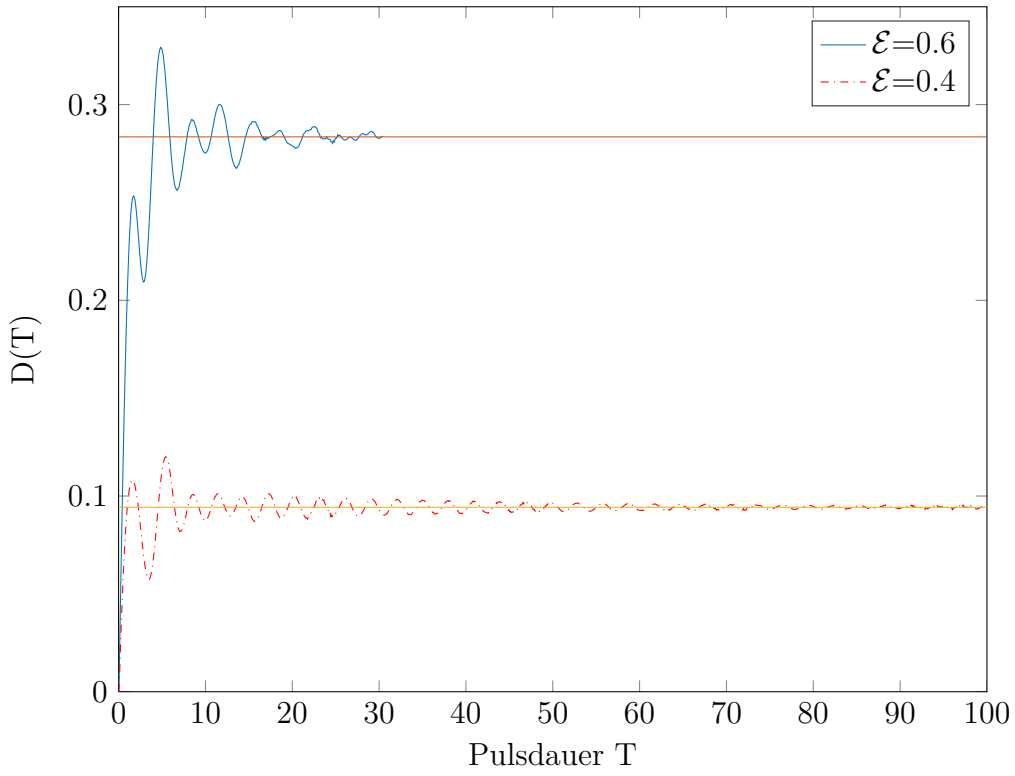

Abbildung 4.7: Normierte Änderung $D(T)$ als Funktion der Pulsdauer T bei verschiedenen Feldstärken $\mathcal{E}$. Es wurde die Einteilchenbasis *07* mit $J_{\max} = 8$ verwendet. Mit eingezeichnet ist die (konstante) normierte Änderung, die aufgrund von Gleichung (2.47) erhalten wird, wenn davon ausgegangen wird, dass im Feld lediglich die Grundzustandsresonanz populiert wird.

der Analyse der komplex skalierten Eigenenergie der Grundzustandsresonanz, die in 4.1.2 durchgeführt wurde, zu erwarten steht. Wie in Abbildung 4.7 zu sehen ist, ist das tatsächlich der Fall. Ein ähnliches Resultat ergibt eine ähnliche Rechnung für einen eindimensionalen Quantenpunkt in [2].

Die vollkommen adiabatische Behandlung des Ionisationsverhaltens des Heliumatoms in einem Rechteckpuls würde bedeuten, dass bei Veränderung der Feldstärke lediglich die Grundzustandsresonanz populiert wird. Wie in Abbildung 4.7 zu sehen ist, nähert sich für große Pulsdauern die normierte Änderung der (konstanten) adiabatischen normierten Änderung an. Es gibt also eine charakteristische Pulsdauer, ab der die Änderung in guter Näherung adiabatisch beschrieben werden kann. Zur Berechnung dieser Zeit, im Folgenden Adiabatizitätszeit genannt, soll nun ein Verfahren motiviert werden.

4.3 Extraktion einer Adiabatizitätszeit

Das Ionisationsverhalten des Heliumatoms für das in dieser Arbeit betrachtete Problem ist durch die Berechnung der Ionisationswahrscheinlichkeit als Funktion der Pulslänge T für verschiedene Feldstärken vollständig charakterisiert. Zur Berechnung einer Adiabatizitätszeit, einer Zeit also, nach der sich die normierte Änderung stabilisiert hat, sind die erhaltenen normierten Änderungen $D(T)$ aber nicht gut geeignet, weil diese von einer Schwingungsbewegung dominiert werden (siehe Abbil-

dung 4.7).

In dem in [2] betrachteten Einelektronensystem wird das Schwingungsverhalten auch beobachtet und auf Anteile der Wellenfunktion zurückgeführt, deren Energie ausreicht, um über die Barrierenschwelle zu propagieren. Sie werden durch eine spektrale Filterfunktion abgetrennt, deren Schwelle anhand der Übergangswahrscheinlichkeitsdichten, wie sie in 4.1.3 diskutiert wurden, bestimmt wird. Die erhaltenen gefilterten Raten spiegeln daher die Tunnelionisationsrate wider. Diese Interpretation kann im Falle von Helium als Zweielektronensystem zumindest in dieser Weise nicht aufrechterhalten werden. Beispielsweise besitzt ein Zustand knapp unter der Barrierenschwelle genügend Energie, dass auch im klassischen Bild ein Elektron über die Barriere ionisieren könnte, solange das andere Elektron die dafür nötige Energie abgibt.

4.3.1 Gefilterte Änderungen

Der Ansatz ist, Bestandteile der Wellenfunktion im Feld, deren Energie höher als eine vorgegebene Schwellenenergie E_{tres} sind, zu ignorieren, um das Schwingungsverhalten der ungefilterten $D(T)$ auszublenden. Nach der Projektion des feldfreien Grundzustandes in die Eigenzustände des Hamiltonoperators im Feld (zum Zeitpunkt $t = 0$) werden also die Besetzungen von Zuständen, deren Energie höher ist als ein noch zu bestimmendes E_{tres}, zu 0 gesetzt. Mit dem verbleibenden Teil der Wellenfunktion wird anschließend verfahren wie in Kapitel 3.2 beschrieben.

Aus den so erhaltenen gefilterten Ionisationswahrscheinlichkeiten $P_{\text{ion}}^{(f)}(T)$ wird analog gemäß

$$D^{(f)}(T) = -\frac{\frac{\mathrm{d}\left(1-P_{\text{ion}}^{(f)}(T)\right)}{\mathrm{d}T}}{1 - P_{\text{ion}}^{(f)}(T)} \tag{4.3}$$

die Größe $D^{(f)}(T)$ berechnet, die im Folgenden gefilterte normierte Änderung genannt wird.

Abbildung 4.8 vergleicht für $\mathcal{E} = 0.6$ die gefilterten $D^{(f)}(T)$ für verschiedene Schwellenenergien. Es ist erkennbar, dass sich ein monotoner Anstieg, wie er auch in [2] erhalten wird, gerade dann ergibt, wenn als Schwellenenergie die Barrierenschwelle

$$E_{\text{tres}} = V_{\text{B}} = -2\sqrt{2\mathcal{E}} \tag{4.4}$$

gewählt wird. Die Barrierenhöhe kann dabei in der Größenordnung 0.1 variiert werden, bevor sich ein qualitativ anderer Verlauf von $D^{(f)}(T)$ ergibt. Diese Beobachtung wird bei allen betrachteten Feldstärken im Bereich zwischen $\mathcal{E} = 0.55$ und $\mathcal{E} = 1.4$ gemacht. Es wird deshalb $E_{\text{tres}} = V_{\text{B}} = -2\sqrt{2\mathcal{E}}$ für die weiteren Rechnungen verwendet. Die Interpretation, dass die so erhaltenen $D^{(f)}(T)$ die Änderung der Tunnelionisationswahrscheinlichkeit beschrieben, ist, wie oben bereits diskutiert, allerdings nicht übertragbar. Außerdem unterscheidet sich der hier verwendete Filter von dem in [2] hinsichtlich der Wahl der Schwellenenergie, und dadurch, dass hier ein scharfer „Schnitt“ bei E_{tres} durchgeführt wird, während in [2] eine gaußförmige Kante gewählt wird.

Die erhaltenen $D^{(f)}(T)$ sind für verschiedene Feldstärken in Abbildung 4.9 aufgeführt. Im ungefähren Bereich der Feldstärken zwischen $\mathcal{E} = 0.55$ und $\mathcal{E} = 1.4$

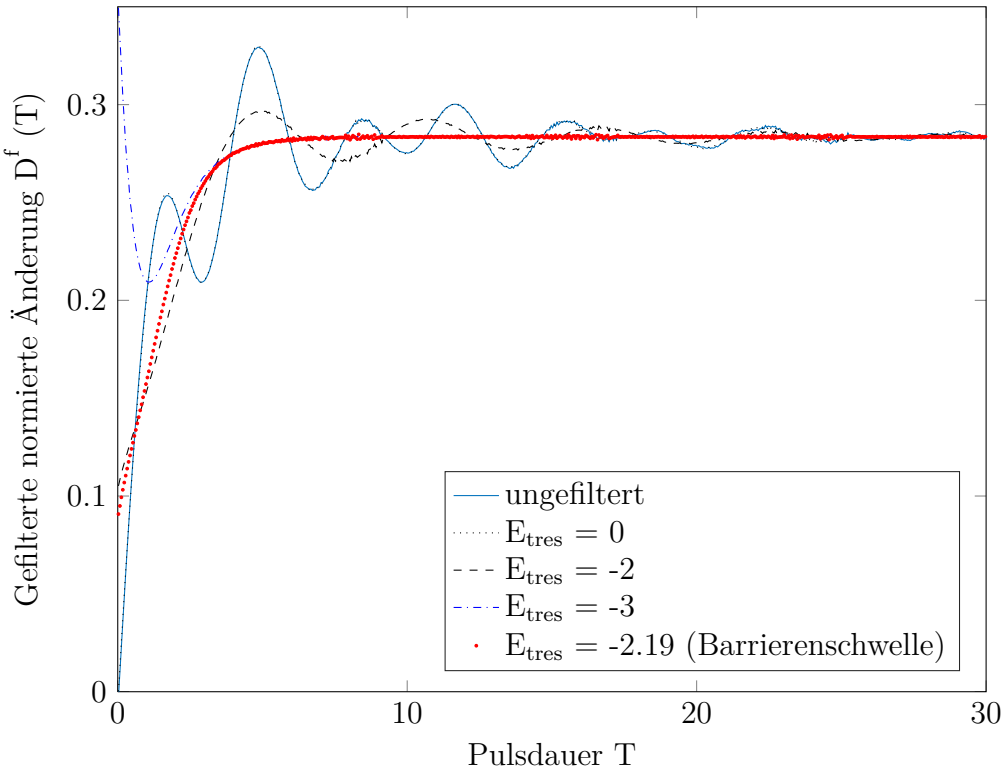

Abbildung 4.8: Gefilterte $D^{(f)}(T)$ bei Feldstärke $\mathcal{E} = 0.6$ unter Berücksichtigung von Zuständen bis zu einer Energie E_{tres}: Die ungefilterte normierte Änderung $D(T)$ ist von der gefilterten $D^{(f)}(T)$ mit $E_{\text{tres}} = 0$ kaum zu unterscheiden. Es wurde die Einteilchenbasis *07* mit $J_{\max} = 8$ verwendet.

ergibt sich der in Abbildung 4.9 gezeigte qualitative Verlauf; jeweils eine monoton ansteigende gefilterte $D^{(f)}(T)$, die nach einer für die Feldstärke charakteristischen Zeit einen konstanten Grenzwert erreicht.

Für größte Feldstärken ab $\mathcal{E} = 1.5$ liegt E_{tres} niedriger als die Grundzustandsresonanz, weswegen sich $D^{(f)}(T)$ ab dieser Feldstärke für große Pulsdauern T nicht mehr der Ionisationsrate der Grundzustandsresonanz annähert. Wie in Abbildung 4.10 zu sehen ist, ergibt sich außerdem bei kleineren Feldstärken ein anderer Verlauf von $D^{(f)}(T)$, hier scheint die Filterung mit der gewählten Barriere $E_{\text{tres}} = -2\sqrt{2\mathcal{E}}$ das Schwingungsverhalten nicht mehr ausreichend zu unterdrücken.

4.3.2 Adiabatizitätszeit

Für den in Abbildung 4.9 gezeigten Bereich kann nun, ebenfalls ähnlich wie in [2], eine Adiabatizitätszeit beziffert werden. Im Unterschied zum dortigen Ansatz, die kürzeste Pulsdauer zu bestimmen, bei der sich die dortige *Tunnelionisationsrate* von ihrem Grenzwert um weniger als 1% unterscheidet, wird hier der Punkt größter Krümmung durch zweimaliges numerisches Ableiten nach vorherigem Glätten der $D^{(f)}(T)$ bestimmt.

Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.11 dargestellt. Sie werden verglichen mit der in (2.30) definierten Keldyshzeit. Dabei wird für das Ionisationspotential die Differenz zwischen dem Grundzustand des Heliumatoms und dem Grundzustand des He^+-Ions verwendet. Tatsächlich ist zu beobachten, dass die Adiabatizitätszeit, wie es der Keldysh-Parameter vermuten lässt, mit zunehmender Feldstärke

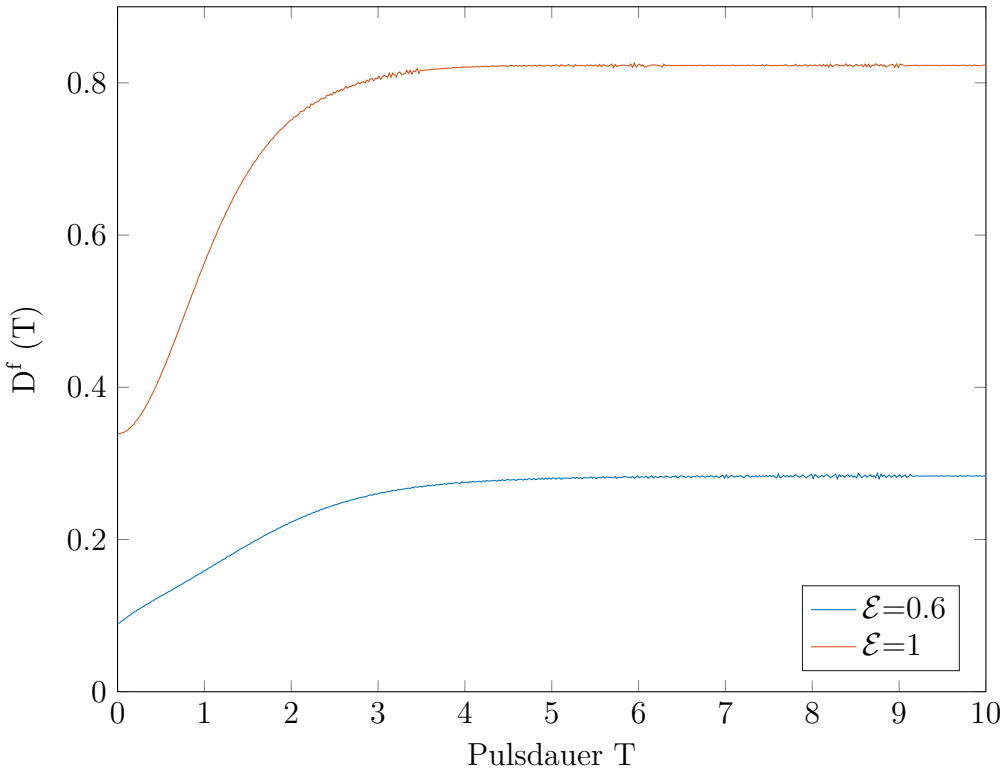

Abbildung 4.9: $D^{(f)}(T)$ als Funktion der Pulsdauer T bei verschiedenen Feldstärken $\mathcal{E}$. Es wurde die Einteilchenbasis *07* mit $J_{\max} = 8$ verwendet. Die Schwellenenergie beträgt feldabhängig $E_{\text{tres}} = -2\sqrt{2\mathcal{E}}$.

abnimmt. Das umgekehrt proportionale Verhalten zur Feldstärke scheint ebenfalls plausibel, was aber aufgrund der wenigen Punkte und ihrer nicht quantifizierten Varianz mit Vorsicht zu genießen ist. Die recht gute Übereinstimmung in absoluten Zahlen schließlich hat, auch wenn Abbildung 4.11 das suggerieren mag, *keine* Bedeutung, da die Keldyshzeit unter Vernachlässigung von konstanten Faktoren der Größenordnung 1 begründet wurde. Ebenso wurde das Verfahren zur Bestimmung der Adiabatizitätszeit in dieser Arbeit motiviert aufgrund von Argumenten, die keine Aussage in absoluten Zahlen — bis auf die Größenordnung — zulassen. Beispielsweise könnte aufgrund der vorangegangenen Argumentation in Analogie zu [2] die Adiabatizitätszeit als die kürzeste Pulsdauer definiert werden, bei der sich $D^{(f)}(T)$ vom adiabatischen Grenzwert um weniger als 1% unterscheidet. Das hätte eine ungefähre Reskalierung der erhaltenen Adiabatizitätszeiten um den Faktor 1.5 zur Folge, diese wären aber auch als Adiabatizitätszeiten im diskutierten Sinne interpretierbar.

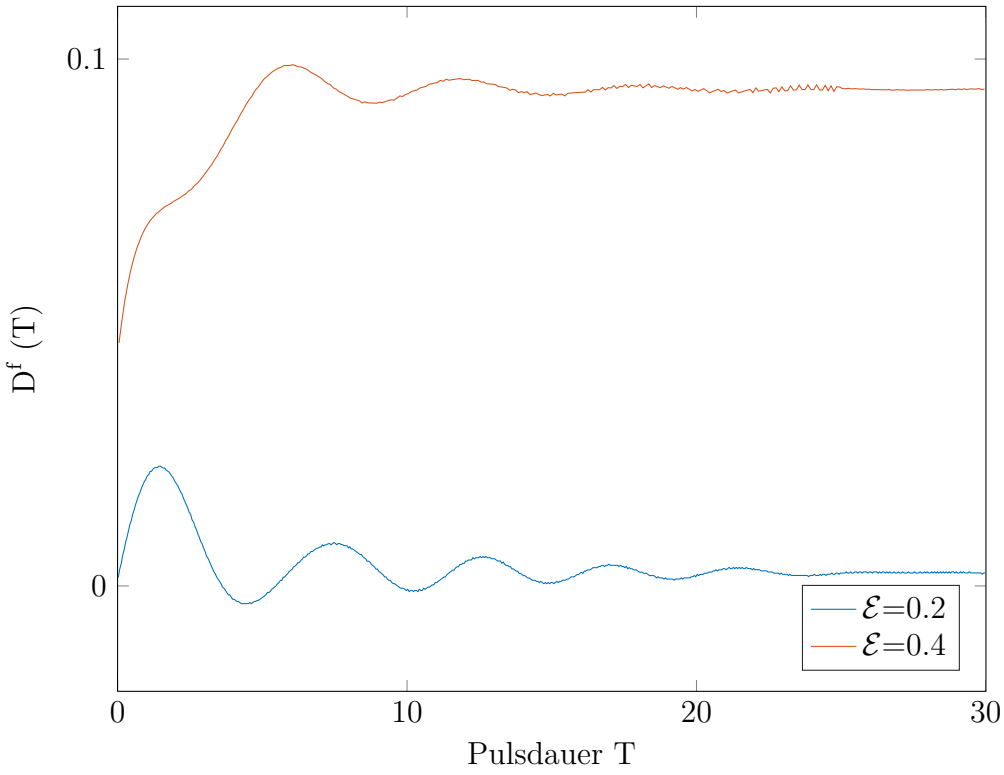

Abbildung 4.10: $D^{(f)}(T)$ als Funktion der Pulsdauer T bei vergleichsweise geringen Feldstärken $\mathcal{E}$. Es wurde die Einteilchenbasis *07* mit $J_{\max} = 8$ verwendet. Die Schwellenenergie beträgt feldabhängig $E_{\text{tres}} = -2\sqrt{2\mathcal{E}}$. Es ergibt sich kein monotoner Anstieg.

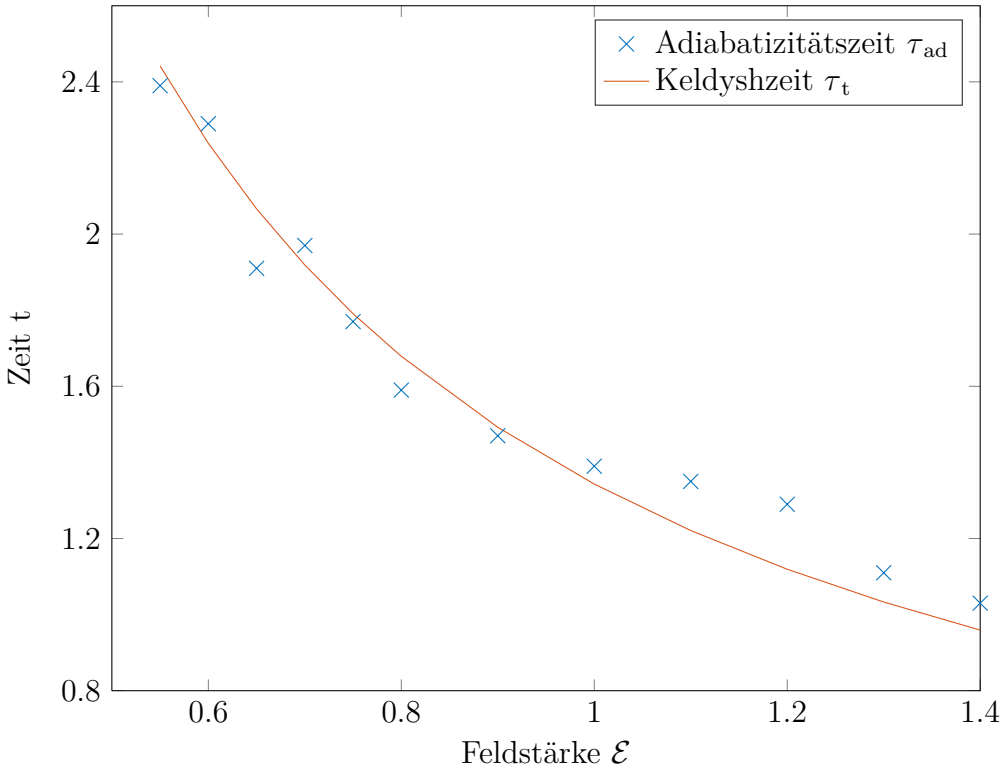

Abbildung 4.11: Vergleich der gefundenen Adiabatizitätszeiten τ_{ad} mit den Keldyshzeiten τ_{t}. Es wurde die Einteilchenbasis *07* mit $J_{\max} = 8$ verwendet.

Kapitel 5

Diskussion

5.1 Zusammenfassung

Einerseits erlaubt die Keldyshzeit aus Gleichung (2.30) eine aus einem klassischen Bild heraus motivierte Aussage darüber, auf welcher Zeitskala sich die Feldstärke, der das Heliumatom ausgesetzt ist, schnellstens ändern darf, sodass das System dieser Änderung noch adiabatisch folgen kann. Andererseits lässt sich an den berechneten normierten Änderungen in Abbildung 4.7 erkennen, dass trotz des vollkommen diabatischen Anschaltvorganges die normierte Änderung der Ionisationswahrscheinlichkeit mit der Pulsdauer für ausreichend lange Pulsdauern in guter Näherung auch erhalten werden kann, wenn der Anschaltvorgang adiabatisch, also durch Population der Grundzustandsresonanz, beschrieben wird. Die normierte Änderung im adiabatischen Grenzfall konnte dabei aufgrund der verwendeten komplexen Skalierung unmittelbar am Imaginärteil der Energie der Grundzustandsresonanz abgelesen werden. Die Schlussfolgerung ist, dass es eine charakteristische Mindestpulsdauer gibt, ab der der Ionisationsvorgang adiabatische Charakteristik aufweist (Adiabatizitätszeit).

Um diese Adiabatizitätszeit zu bestimmen, wurde in Abschnitt 4.3 eine Rechnung vorgeschlagen, die darauf basiert, den oszillatorischen Kurvenverlauf zu eliminieren, indem Zustände mit Energien, die höher sind als die Barrierenschwelle, herausgefiltert werden. Dieser Vorschlag basiert auf [2], wo für einen eindimensionalen Einteilchenquantenpunkt eine ähnliche Rechnung durchgeführt wurde. Die physikalische Bedeutung der Barrierenschwelle als die Schwellenenergie der over-the-barrier-Ionisation lässt sich jedoch nicht ad hoc auf ein Zweiteilchensystem wie das Heliumatom übertragen.

Die gefundenen Adiabatizitätszeiten charakterisieren also eine Pulsdauer, nach der sich das Wellenpaket in Bezug auf die Ionisationsdynamik wieder quasistatisch verhält. Die Erwartung ist, dass diese Pulsdauer mit der Zeitskala, auf der das Wellenpaket einer sich ändernden Feldstärke noch quasistatisch folgen kann, der Keldyshzeit also, im Zusammenhang steht. Das scheint, wie der Vergleich in Abbildung 4.11 nahelegt, wenigstens qualitativ der Fall zu sein.

5.2 Zeitpropagation: Vergleich mit der Bachelorarbeit von Sebastian Werblinski

Die Nomenklatur der folgenden Erläuterung ist aus Gleichung (3.21) übernommen.

Sebastian Werblinski berechnete in seiner Bachelorarbeit [4] die Zeitpropagation durch Multiplikation der Koeffizienten mit dem Exponentialterm, der nur den Imaginärteil der komplexen Energie berücksichtigt, d.h.

$$\beta_{\mathrm{i}0} = \alpha_{\mathrm{i}0} \cdot \exp(-\left|\mathrm{Im}\left(E_{\mathrm{i}}\right)\right| t) \quad . \tag{5.1}$$

Es wird also die Ionisationswahrscheinlichkeit über die Interpretation des Imaginärteils der Energie als Lebensdauer des Zustandes berechnet, und der Realteil wird vernachlässigt. Diese Realteile erzeugen bei der Zeitpropagation des Wellenpaketes Interferenzeffekte, die durch eine Rechnung nach Gleichung (5.1) daher nicht berücksichtigt werden.

Wie in Abbildung 5.1 gezeigt ist, zeigen die nach Gleichung (5.1) berechneten normierten Änderungen kein Schwingungsverhalten mehr. Außerdem ergeben sich

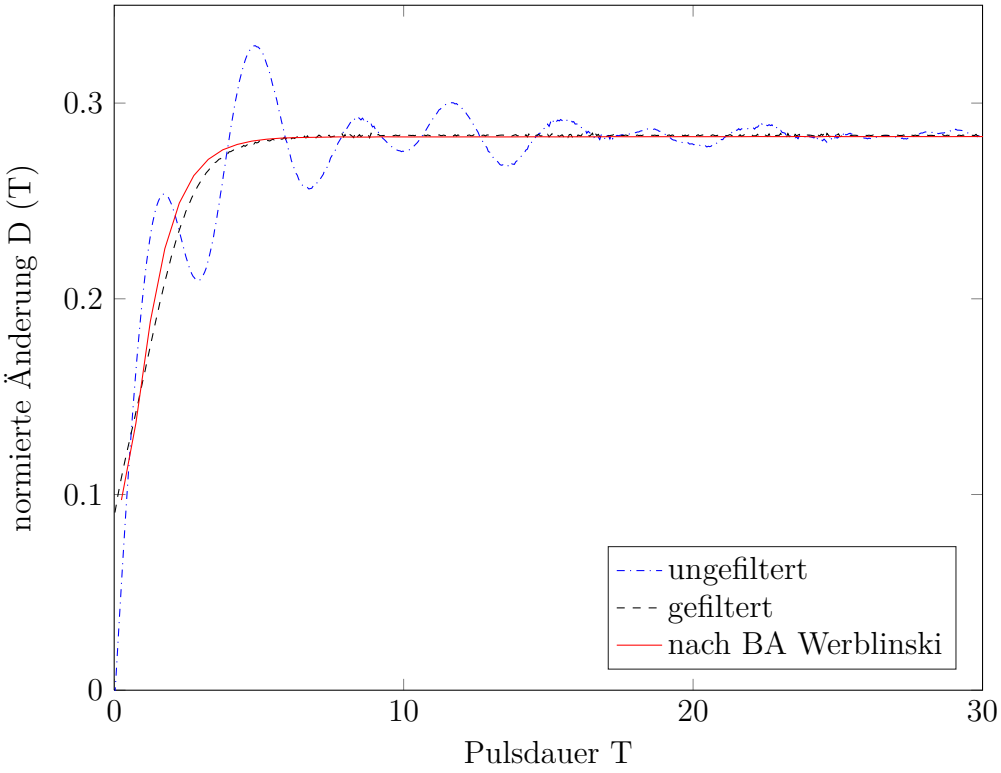

Abbildung 5.1: Vergleich der ungefilterten, gefilterten, sowie der nach Propagation durch Gleichung (5.1) erhaltenen $D(T)$ bei Feldstärke $\mathcal{E} = 0.6$. Es wurde die Einteilchenbasis *07* mit $J_{\max} = 8$ verwendet.

sehr ähnliche Kurvenverläufe wie für die gefilterten normierten Änderungen, die nach Abschnitt 4.3.1 berechnet wurden.

Der in dieser Arbeit verwendete Filter ignoriert, wie in 4.3 dargestellt wurde, Zustände hoher Energie, die ein Schwingungsverhalten der normierten Änderungen verursachen. In [4] werden diese Zustände nicht explizit ignoriert, aber Interferenzeffekte des Wellenpaketes werden vernachlässigt. Aus der Ähnlichkeit der Kurven in Abbildung 5.1 kann also gefolgert werden, dass die hochenergetischen Zustände Interferenzeffekte verursachen, die zum oszillatorischen Kurvenverlauf von $D(T)$ führen.

5.3 Effektives Einteilchenpotential

Wie in Abschnitt 2.1.2.4 angemerkt, ist eine Unterteilung des statischen Ionisationsverhaltens in over-the-barrier-Ionisation und Tunnelionisation im Mehrteilchenbild nicht möglich. In Einteilchendarstellung unter Verwendung des effektiven Einteilchenpotentials aus [7] lässt sich aber die Barrierenhöhe dieses Einteilchenpotentials berechnen. Eine Möglichkeit, die Adiabatizitätszeit der Einteilchentunnelionisation zu betrachten, bestünde darin, die in Abschnitt 4.3.1 vorgestellte Rechnung durchzuführen, dabei als Schwelle aber nicht $V_{\mathrm{B}} = -2\sqrt{2\mathcal{E}}$, die Barrierenhöhe des Zweiteilchenpotentials, sondern die Barrierenhöhe des oben genannten Einteilchenpotentials zu verwenden. Die so erhaltene normierte Änderung könnte dann als normierte Änderung der Tunnelionisationswahrscheinlichkeit interpretiert werden. Dies wurde für diese Arbeit auch versucht, war aber aus dem folgenden Grund praktisch nicht durchführbar.

Die Barrierenhöhe der Einteilchenionisation liegt bei Feldstärken ab $\mathcal{E} = 0.24$ bereits unterhalb der Energie der Grundzustandsresonanz. Für Feldstärken ab $\mathcal{E} = 0.24$ ist in der Rechnung mit Filter also die Grundzustandsresonanz nicht mehr enthalten; der adiabatische Grenzfal kann also auch für beliebig lange Pulse nicht erhalten werden. Die Rechnung muss also für Feldstärken unter $\mathcal{E} = 0.24$ durchgeführt werden. Im Bereich dieser Feldstärken besteht die Problematik, dass schon die Beschreibung der Grundzustandsresonanz sehr ungenau (vgl. Abbildung 4.4) ist. Die erhaltenen normierten Änderungen sind also nicht auf ihre Konsistenz zu überprüfen, insbesondere weil der Vergleich über einen größeren Bereich nicht möglich ist. Für die im Zusammenhang mit dem Einteilchenpotential wirklich interessanten Feldstärken konnten also mit dem in dieser Arbeit gewählten Lösungsansatz keine Rechnungen durchgeführt werden.

5.4 Tunnelionisationszeit

Die Annahme des Tunnelns als dominierender Ionisationsprozess ist eine Näherung, die, wie Abbildung 2.2 verdeutlicht wurde, in zwei verschiedene Richtungen abgegerenzt werden muss. Einerseits muss die Feldstärke des anregenden Feldes gering genug sein. Zur Abschätzung der Feldstärke, bis zu der Tunnelionisation eine dominante Rolle spielt, kann die in Abbildung 2.2 gegebene Formel benutzt werden, wobei als Ionisationspotential die Differenz zwischen den Grundzuständen des He^+-Ions und des Heliumatoms verwendet wird. Diese Grenzfeldstärke beträgt 0.2. Das war, wie oben erwähbt, in dieser Arbeit die Untergrenze, bis zu der überhaupt konvergierende Grundzustandsresonanzen gefunden wurden, insbesondere der darunterliegende Bereich konnte also nicht systematisch untersucht werden.

Andererseits muss die quasistatische Näherung gelten, eine gewisse Frequenz darf also nicht überschritten werden. Diese Abgrenzungsrichtung wiederum wurde in dieser Arbeit untersucht; es wurden quantitative Aussagen über die adiabatische Reaktionszeit des Heliumatoms getroffen.

Der nachfolgende Kommentar zum Tunnelzeitexperiment wird sich also auf den Teil der herkömmlichen Interpretation desselben beziehen, der den adiabatischen Aspekt der Tunnelionisation benutzt.

Tunnelzeitdebatte

In den Messungen zur Tunnelverzögerungszeit wird versucht, durch periodisches Ändern der Richtung des elektrischen Feldes bei gleichzeitigem periodischem Ändern des Betrages der elektrischen Feldstärke die Differenz des Zeitpunktes des Eintrittes eines (klassischen) Elektrons in die klassisch verbotene Barriere zum Zeitpunkt seines Austrittes aus dieser Barriere zu bestimmen. Damit Tunneln tatsächlich die dominante Ionisationsart ist, muss, wie oben diskutiert, einerseits die Feldstärke gering genug sein — was, wie in [1] beschrieben, tatsächlich der Fall ist — und andererseits muss die Frequenz klein genug sein, damit $\gamma_{\mathrm{Kel}} \ll 1$ erfüllt ist. Letzteres ist in diesem Experiment *nicht* der Fall, γ_{Kel} ist in der Größenordnung von 1. Tunnelionisation im strengen Sinne von Abbildung 2.2 findet also *nicht* statt. Der Ionisationsprozess muss also vor dem Hintergrund bisher nicht diskutierter Näherungen interpretiert werden, und dieses neue Regime wird in [1] nichtadiabatisches Tunnelregime genannt.

Die herkömmliche Interpretation des Experimentes geht, wie in [18] übersichtlich dargestellt, neben anderen Annahmen unter anderem davon aus, dass die Wahrscheinlichkeit, dass Tunnelionisation stattfindet, zu dem Zeitpunkt am höchsten ist, zu dem die Feldstärke am stärksten ist. Diese Annahme stimmt im Grenzfall des adiabatischen Bildes der Tunnelionisation, wo sich das elektrische Feld so langsam ändert, dass zu jedem Zeitpunkt die Ionisation als instantan einsetzend betrachtet werden kann. Nun gilt aber nicht $\gamma_{\mathrm{Kel}} \ll 1$, sondern $\gamma_{\mathrm{Kel}} \approx 1$. Obwohl also das reine Multiphotonenbild hier noch nicht angemessen ist, sind in diesem Bereich adiabatische Effekte schon zu berücksichtigen. Insbesondere ist ist die Annahme, dass die Tunnelionisation dann am stärksten ist, wenn die Feldstärke am höchsten ist, fraglich. Es wurde in dieser Arbeit gesehen, dass die Wellenfunktion erst nach einer charakteristischen Zeit in der Lage ist, dem zeitlich veränderten Potential zu folgen.

5.5 Ionisationszeit

Dieser letztgenannte Kritikpunkt besteht unabhängig vom Tunnelregime, allgemein für Experimente, die Ionisationszeiten im Sinne des Attoclock-Experimentes messen sollen. Die naive Idealvorstellung eines solchen Experiments wäre die Erzeugung eines beliebig kurzen Laserpulses bei sehr hoher Feldstärke zur genauen Festlegung des Zeitpunktes des „Beginns“ der Ionisation, gepaart mit einem Mechanismus zur Bestimmung des Zeitpunktes der „vollendeten“ Ionisation. Die normierten Änderungen $D(T)$ in Abbildung 4.7 zeigen aber, dass die Ionisation im Grenzwert $T \to 0$ 0 ist. Die Wellenfunktion kann dem kurzen Puls nicht folgen und bleibt unverändert. Längere Pulsdauern hingegen erlauben es nicht mehr, klar zu bestimmen, wann „Beginn“ des Ionisationsprozesses ist. Während der Pulsdauer etabliert sich die Ionisation im quantenmechanischen Sinne, nämlich propagiert das Wellenpaket nach und nach in den Unterraum der ungebundenen Zustände. Beliebig kleine Ionisationswahrscheinlichkeiten lassen sich nach beliebig kurzen Pulsdauern beobachten, bis die Ionisationswahrscheinlichkeit bei Pulsdauern in der Größenordnung der Adiabaizitätszeit quasistatisch wird. Es gibt keine endliche Ionisationszeit, vereinbar mit dem quantenmechanischen Bild ist lediglich die Aussage, dass sie verschieden von 0 ist.

Anhang A

Erläuterung zur Bahndrehimpulssymmetrie

Betrachtet sei erneut der Ortsanteil der Basisfunktionen in gekoppelter Darstellung (Gleichung (3.8)):

$$|\mathrm{Ort}_\mathrm{i}^{\pm}\rangle = (|R_{\mathrm{p_i}} R_{\mathrm{q_i}}\rangle \otimes |l_{\mathrm{p_i}} l_{\mathrm{q_i}}\rangle \pm |R_{\mathrm{q_i}} R_{\mathrm{p_i}}\rangle \otimes |l_{\mathrm{q_i}} l_{\mathrm{p_i}}\rangle) \otimes \left(\sum_{\mathrm{JM}} C^{JM}_{\mathrm{l_{p_i} m_{p_i} l_{q_i} m_{q_i}}} |JM\rangle\right) \tag{A.1}$$

$$= |\mathrm{Rest_i}\rangle \otimes \left(\sum_{\mathrm{JM}} C^{JM}_{\mathrm{l_{p_i} m_{p_i} l_{q_i} m_{q_i}}} |JM\rangle\right)$$

mit der Bedingung

$$C^{J_0 M_0}_{\mathrm{l_{p_i} m_{p_i} l_{q_i} m_{q_i}}} \neq 0 \quad . \tag{A.2}$$

Die Behauptung lautet nun, dass jeder Eigenzustand des *feldfreien* Hamiltonoperators $\hat{\mathrm{H}}^{(0)}_\theta$

$$|\psi^{(0)}_\mathrm{j}\rangle = \sum_\mathrm{i} c_\mathrm{ij} |i\rangle \tag{A.3}$$

mit Basiszuständen

$$|i\rangle = |\mathrm{Ort}_\mathrm{i}^{\pm}\rangle \otimes |\mathrm{Spin}^{\mp}\rangle \quad , \tag{A.4}$$

wobei die Ortsanteile $|\mathrm{Ort}_\mathrm{i}^{\pm}\rangle$ Bedingung (A.2) erfüllen, die Form

$$|\psi^{(0)}_\mathrm{j}\rangle = |\tilde{R}_\mathrm{j}\rangle \otimes |\mathrm{Spin}^{\mp}\rangle \otimes |J_0 M_0\rangle \tag{A.5}$$

annimmt. Wegen

$$C^{JM}_{\mathrm{l_{p_i} m_{p_i} l_{q_i} m_{q_i}}} = \delta_{\mathrm{M,m_{p_i}+m_{q_i}}} C^{JM}_{\mathrm{l_{p_i} m_{p_i} l_{q_i} m_{q_i}}} \tag{A.6}$$

folgt unmittelbar

$$|\mathrm{Ort}_\mathrm{i}^{\pm}\rangle = |\mathrm{Rest_i}\rangle \otimes \left(\sum_\mathrm{J} C^{JM_0}_{\mathrm{l_{p_i} m_{p_i} l_{q_i} m_{q_i}}} |JM_0\rangle\right) \tag{A.7}$$

mit $m_{\mathrm{p_i}} + m_{\mathrm{q_i}} = M_0$. Weil Helium kein reines $\frac{1}{r}$-Potential besitzt, ist die Energie in J nicht entartet. Ein Eigenzustand bestimmter Energie ist also immer auch Eigenzustand eines bestimmten $\tilde{J}$. Dies und Gleichung (A.7) ausnutzend, ist $|\psi^{(0)}_\mathrm{j}\rangle$ folglich Eigenzustand zu $\hat{\mathrm{J}}^2$ und $\hat{\mathrm{J}}_\mathrm{z}$ mit den Eigenwerten $\tilde{J}(\tilde{J}+1)$ und M_0.

Die Gegenteilbehauptung zu (A.3) lautet dann, dass $\tilde{J} \neq J_0$, d.h.

$$\begin{aligned} & \langle J_0 M_0 | \psi_\mathrm{j} \rangle = 0 \\ \Leftrightarrow \sum_\mathrm{i} c_\mathrm{ij} C^{J_0 M_0}_{\mathrm{l_{p_i} m_{p_i} l_{q_i} m_{q_i}}} & |\mathrm{Rest_i}\rangle = 0 \quad . \end{aligned} \tag{A.8}$$

Die $|\mathrm{Rest_i}\rangle$ zweier Konfigurationen sind genau dann gleich, wenn die beiden Einteilchenwellenfunktionen

$$|\Phi_\mathrm{i}\rangle = |R_\mathrm{i}\rangle \otimes |l_\mathrm{i} m_\mathrm{i}\rangle \tag{A.9}$$

bezüglich der Radialteile $|R_\mathrm{i}\rangle$ und der Quantenzahl l_i für beide Konfigurationen gleich gewählt wurden, wobei aber verschiedene m_i vorkommen können. Ansonsten sind die $|\mathrm{Rest_i}\rangle$ linear unabhängig. Nimmt man den Spezialfall an, dass zwei Konfigurationen immer bezüglch der Radialteile $|R_\mathrm{i}\rangle$ und der Quantenzahl l_i verschieden gewählt werden, und nicht nur verschieden bezüglich der Quantenzahl m_i, so folgt deshalb

$$\forall i : c_\mathrm{ij} C^{J_0 M_0}_{\mathrm{l_{p_i} m_{p_i} l_{q_i} m_{q_i}}} = 0 \tag{A.10}$$

und damit aufgrund der Bedingung (A.2):

$$\forall i : c_\mathrm{ij} = 0 \quad , \tag{A.11}$$

also $|\psi^{(0)}_\mathrm{j}\rangle \equiv 0$. Daher muss $\tilde{J} = J_0$ gelten.

Die so ausgewählten Konfigurationen spannen also den Unterraum auf, in dem alle Eigenzustände zum Hamiltonoperator auch Eigenzustände zu $\hat{\mathrm{J}}^2$ und $\hat{\mathrm{J}}_\mathrm{z}$ mit den Eigenwerten $J_0(J_0+1)$ und M_0 sind. Die Überlegung lässt sich natürlich in gleicher Weise für eine andere Auswahl der m_i bei verschiedenen Radialteilen $|r_\mathrm{i}\rangle$ und Quantenzahlen l_i wiederholen, hier gilt das gleiche. Damit gilt es auch für die Vereinigung aller dieser Sets von Konfigurationen, und damit auch im allgemeinen Fall, dass sich zwei Konfigurationen nicht bezüglich der Radialteile $|r_\mathrm{i}\rangle$ und der Quantenzahl l_i unterscheiden, sondern nur bezüglich der m_i.

Anhang B

Auszüge aus den verwendeten Programmen

B.1 Auszug aus twostoe

Die ursprüngliche Idee bestand darin, die feldfreie Schrödingergleichung für verschiedene J - Symmetrien zu lösen, und dann im zweiten Schritt die Schrödingergleichung im Feld in dieser feldfreien Eigenbasis zu lösen. Dabei kann ausgenutzt werden, dass die im zweiten Schritt verwendeten Eigenzustände dann wohldefinierte J besitzen, und keine Überlagerung von verschiedenen J sind, wie es der Fall ist, wenn wie in dieser Arbeit Konfigurationen von Einteilchen-*Slater-Type-Orbitals* verwendet werden. Die Hamiltonmatrix im Feld lässt sich so aufgrund der Dipolauswahlregeln stark vereinfachen; es ergibt sich eine Diagonalmatrix mit symmetrischen Nebendiagonalblöcken aufgrund des Dipoloperators.

Diese Methode wurde implementiert, ergab aber offensichtlich falsche Ergebnisse. Leider erst nach einiger Zeit hat sich herausgestellt, dass dieser Fehler darauf basiert, dass die Eigenvektoren, die die Diagonalisierungsroutine DIAGMT bestimmt, entweder falsch ausgelesen wurden, was nach mehrmaliger Überprüfung eher unwahrscheinlich scheint, oder aber die Eigenvektoren selbst fehlerhaft sind, während die Eigenwerte korrekt sind. Daher wurde der in Abschnitt 3.1 vorgestellte direkte Ansatz gewählt, die Matrix direkt in der STO-Basis zu diagonalisieren. Die erhaltenen Eigenwerte wurden in Kapitel 4 vorgestellt.

Da für die Projektion während des plötzlichen Anschaltens trotzdem die korrekten Eigenvektoren des gesamten Problems benötigt werden, wurde die Diagonalisierung in MATLAB mit der eingebauten Funktion EIG wiederholt. Dabei wurde festgestellt, dass EIG in etwa um den Faktor 4 schneller ist als die Fortran-Routine DIAGMT. Die Eigenwerte beider Diagonalisierungsroutinen stimmen überein. Die Resonanzsuche wurde also mit den Eigenwerten aus DIAGMT durchgeführt, die entsprechenden Eigenvektoren durch EIG bestimmt.

Nachfolgend die zentrale Passage des Unterprogramms SCLMAT des Programms TWOSTOE, das die komplex skalierte Hamiltonmatrix in der STO-Basis zusammenstellt. Auf das Aufführen des Einlese- und Speicherteils wird verzichtet.

```
C*      ******************
C*      [...] Programmkopf
C*      ******************
C*
```

```
C*     Calculate the scaling factors (real and imaginary
   parts):
C*
       kinscr = ( DCOS(-2.0D+00*theta) / (rho*rho) )
       kinsci = ( DSIN(-2.0D+00*theta) / (rho*rho) )
       potscr = ( DCOS( - theta ) / rho )
       potsci = ( DSIN( - theta ) / rho )
       dpzscr = ( DCOS( theta ) * rho )
       dpzsci = ( DSIN( theta ) * rho )
C*
C*     *****************
C*     [...] Einleseteil
C*     *****************
C*
C*      Read the kinetic energy matrix:
C*
       READ(ikin) ichk,lval
       READ(ikin) ikrow,iloop
       IF (ikrow.GT.imatmx) THEN
        WRITE(iw,30)
   30   FORMAT(/,'    ***** ERROR !!! *****',/)
        WRITE(iw,35)
   35   FORMAT(X,'    Matrix is too big, change PARAMETER
      imatmx !')
        CLOSE(ikin)
        CLOSE(irea)
        CLOSE(iimg)
        STOP
       ENDIF
       READ(ikin) (mat(i),i=1,iloop)
C*
C*      Add the scaled kinetic energy to the final matrix:
C*
       DO 110 j=1,ikrow
         DO 100 i=1,ikrow
           IF (i.GE.j) THEN
             ind = ( (i-1)*i / 2 ) + j
           ELSE
             ind = ( (j-1)*j / 2 ) + i
           ENDIF
           realmt(i,j) = mat(ind) * kinscr
           imagmt(i,j) = mat(ind) * kinsci
  100    CONTINUE
  110  CONTINUE
C*
C*      Read the potential energy matrix:
C*
       READ(ipot) ichk,lval
       READ(ipot) iprow,iloop
```

```
      IF (ikrow.NE.iprow) THEN
        WRITE(iw,130)
  130   FORMAT(/,'   ***** ERROR !!! *****',/)
        WRITE(iw,135)
  135   FORMAT(X,'   Kinetic and potential energy matrices
     have ',
     +     'different dimensions !?!')
        WRITE(iw,140) ikrow,iprow
  140   FORMAT(X,'   T matrix :   ',I4,'   V matrix :   ',I4
     ,//)
        CLOSE(ipot)
        STOP
      ENDIF
      READ(ipot) (mat(i),i=1,iloop)
C*
C*    Add the scaled potential energy to the final matrix:
C*
      DO 210 j=1,iprow
        DO 200 i=1,iprow
          IF (i.GE.j) THEN
            ind = ( (i-1)*i / 2 ) + j
          ELSE
            ind = ( (j-1)*j / 2 ) + i
          ENDIF
          realmt(i,j) = realmt(i,j) + ( mat(ind) * potscr )
          imagmt(i,j) = imagmt(i,j) + ( mat(ind) * potsci )
  200   CONTINUE
  210 CONTINUE
C*
C*    Read the dipole matrix:
C*
      READ(idpz) ichk,lval
      READ(idpz) idrow,iloop
      IF (ikrow.NE.idrow) THEN
        WRITE(iw,130)
        WRITE(iw,136)
  136   FORMAT(X,'   Kinetic and dipole energy matrices
     have ',
     +     'different dimensions !?!')
        WRITE(iw,141) ikrow,idrow
  141   FORMAT(X,'   T matrix :   ',I4,'   D matrix :   ',I4
     ,//)
        CLOSE(idpz)
        STOP
      ENDIF
      READ(idpz) (mat(i),i=1,iloop)
C*
C*    Add the scaled dipole matrix to the final matrix,
C*    multiplied with the right charge (minus 1) and field
```

```
   strength:
C*
      DO 310 j=1,idrow
        DO 300 i=1,idrow
          IF (i.GE.j) THEN
            ind = ( (i-1)*i / 2 ) + j
          ELSE
            ind = ( (j-1)*j / 2 ) + i
          ENDIF
          realmt(i,j) = realmt(i,j) - ( field * mat(ind) *
             dpzscr )
          imagmt(i,j) = imagmt(i,j) - ( field * mat(ind) *
             dpzsci )
  300   CONTINUE
  310 CONTINUE
C*
C*    ******************
C*    [...] Speicherteil
C*    ******************
C*
```

B.2 Berechnung der Projektion

Hier wurde die MATLAB - Routine PROJECTION geschrieben.

```
function [ exini,ewini,exfin,ewfin,coeff ]
                = projection(source,basis,lmax,theta,
                   fieldini,fieldfin)
%       projection calculates the overlap between
%       two eigenvector-sets of different fieldstrengts,
%       but both for the same scaling angle
%       For now, the program diagonalizes the hamilton
   matrix itself,
%       since the eigenvectors of diagmt seem to be wrong.
%
  FIL1    = ['heb' basis 'ci' 'L' num2str(lmax)];
  FIL2ini = [FIL1 'F' num2str(fieldini) 'th' num2str(theta)
     ];
  FIL2fin = [FIL1 'F' num2str(fieldfin) 'th' num2str(theta)
     ];

%    load eigenvectors and eigenvalues
  load([source '/' FIL2ini '.exm'],'-mat','exini')
  load([source '/' FIL2ini '.ewm'],'-mat','ewini')

  load([source '/' FIL2fin '.exm'],'-mat','exfin')
  load([source '/' FIL2fin '.ewm'],'-mat','ewfin')

  %find coefficients
```

```
  coeff = (exfin.')*exini;

end
```

B.3 Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeitsdichte

Zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeitsdichte wurde die MATLAB - Routine TRPROP geschrieben.

```
 function [ data ] = trprop(refresh,source,basis,lmax,
    fieldini,fieldfin,state,theta,left,right,step)
%
%   Calculates the transition propability of any FIELDINI
    state into the FIELDFIN
%   spectrum.
%   The FIELDINI states have to be bound, so fieldini = 0
%
%

energies = [left:step:right];

if(refresh)
  [ hxini,hxiini,exini,ewini,hxfin,exfin,ewfin ] =
     diagonalize(source,basis,lmax,theta,fieldini,fieldfin);
end
  % find eigensets

[ exini,ewini,exfin,ewfin,coeff ] = projection(source,basis,
   lmax,theta,fieldini,fieldfin);

[m,n] = size(exini);

leftInnerProduct  = (exini.')*exfin;

rightInnerProduct = (exfin.')*exini;

summe = @(E) 0;
for l = 1:n
  summe = @(E) summe(E) + (leftInnerProduct(state,l)*
     rightInnerProduct(l,state))./(ewfin(l)-E);
end
dPdE(1,:) = 1/pi * imag(summe(energies));


data = [energies;dPdE]';

end
```

B.4 Propagation der zeitabhängigen Schrödingergleichung

Unter Verwendung der in B.2 vorgestellten Routine berechnet ONOFF die Propagation im Feld, die Rückprojektion, sowie die Überlebenswahrscheinlichkeit.

```
function [ data ] = onoff( refresh,source,basis,lmax,
   fieldini,fieldfin,tvec,theta )
%[ data ] = onoff( refresh,source,basis,lmax,fieldini,
   fieldfin,tvec )
%
%   complex scaled, propagating in-field, back-projection,
%   propability of finding a state with Re(E)<-2
%
%   Method for positive imaginary energy: setting the
   coefficients
%   of states with a positive imaginary energy to zero.
%
Psurvive = [];

if(refresh)
  [ hxini,hxiini,exini,ewini,hxfin,exfin,ewfin ] =
     diagonalize(source,basis,lmax,theta,fieldini,fieldfin);
end

% find eigensets and coefficients

[ exini,ewini,exfin,ewfin,coeff ] = projection(source,basis,
   lmax,theta,fieldini,fieldfin);

[m,n] = size(exini);

%  small test
test1 = exini(:,1);
test2 = 0;
for j = 1:m
  test2=test2+coeff(j,1)*exfin(:,j);
end
guete = norm(test1-test2)

%  propagate the coefficients

for it=1:length(tvec)
  coeffprop = zeros(n,m);
  coeffafterprop = zeros(n,m);
  t=tvec(it)
%    t=1;

  for j=1:n %loop over different initial states, the most
     interesting is j=1
```

```
    for k=1:m
      if(imag(ewfin(k))<=0)
        coeffprop(k,j) = coeff(k,j)*exp(-i*ewfin(k)*t);
      else
        coeffprop(k,j) = 0;
      end
    end
  end

  coeffafterprop = (coeff.')*coeffprop;

  if(round(it/10) == it/10)
%       small test after every 10th iteration
    test1 = 0;
    test2 = 0;

    for j = 1:n
      test1=test1+coeffprop(j,1)*coeff(j,:);
    end
    test1 = test1.';
    test2 = coeffafterprop(:,1);

    guete2 = norm(test1-test2)

  end

%    calculate norm
%    Survival propability is the propability that the state
   real part of the state after propagation is lower than -2
%    The propability that the Groundstate is in the l-th
   state after propagation is abs(coeffafterprop(l,1)^2)
  groundnormbound = 0;

  for l = 1:n
    if(real(ewini(l))<-2)
      groundnormbound=groundnormbound+abs(coeffafterprop(l
          ,1))^2;
    end
  end

  Psurvive(it)=groundnormbound;
end

%  Save data
%
data = [tvec ; Psurvive]';

end
```

Anhang C

Beispielhafter Basissatz

Die Einteilchenbasis *07* besteht aus Slater-Type-Orbitalen. Diese werden über die Parameter ζ, n, l und m spezifiziert (vgl. Gleichungen (3.5) und (3.6)).

```
*
*     He atom ( Basis 07 )
*
$BASIS
*
   Nuclear charge :    2.00000000000D+00
*
   Number of basis functions :  120
*
*
*    n     l     m     zeta
*
     1     0     0     2.80
     1     0     0     1.60
     2     0     0     1.60
     3     0     0     1.60
     4     0     0     1.60
     5     0     0     1.00
     6     0     0     1.00
     7     0     0     1.00
     8     0     0     1.00
     9     0     0     0.80
    10     0     0     0.80
    11     0     0     0.40
    12     0     0     0.40
    13     0     0     0.40
    14     0     0     0.40
     2     1     1     2.80
     2     1     1     1.60
     3     1     1     1.60
     4     1     1     1.60
     5     1     1     1.60
     6     1     1     1.00
     7     1     1     1.00
```

8	1	1	1.00
9	1	1	0.80
10	1	1	0.80
11	1	1	0.40
12	1	1	0.40
13	1	1	0.40
14	1	1	0.40
2	1	0	2.80
2	1	0	1.60
3	1	0	1.60
4	1	0	1.60
5	1	0	1.60
6	1	0	1.00
7	1	0	1.00
8	1	0	1.00
9	1	0	0.80
10	1	0	0.80
11	1	0	0.40
12	1	0	0.40
13	1	0	0.40
14	1	0	0.40
2	1	−1	2.80
2	1	−1	1.60
3	1	−1	1.60
4	1	−1	1.60
5	1	−1	1.60
6	1	−1	1.00
7	1	−1	1.00
8	1	−1	1.00
9	1	−1	0.80
10	1	−1	0.80
11	1	−1	0.40
12	1	−1	0.40
13	1	−1	0.40
14	1	−1	0.40
3	2	−2	1.60
4	2	−2	1.60
5	2	−2	1.60
3	2	−1	1.60
4	2	−1	1.60
5	2	−1	1.60
3	2	0	1.60
4	2	0	1.60
5	2	0	1.60
3	2	1	1.60
4	2	1	1.60
5	2	1	1.60
3	2	2	1.60
4	2	2	1.60

5	2	2	1.60
4	3	−3	1.60
5	3	−3	1.60
6	3	−3	1.60
4	3	−2	1.60
5	3	−2	1.60
6	3	−2	1.60
4	3	−1	1.60
5	3	−1	1.60
6	3	−1	1.60
4	3	0	1.60
5	3	0	1.60
6	3	0	1.60
4	3	1	1.60
5	3	1	1.60
6	3	1	1.60
4	3	2	1.60
5	3	2	1.60
6	3	2	1.60
4	3	3	1.60
5	3	3	1.60
6	3	3	1.60
5	4	−4	1.60
6	4	−4	1.60
7	4	−4	1.00
5	4	−3	1.60
6	4	−3	1.60
7	4	−3	1.00
5	4	−2	1.60
6	4	−2	1.60
7	4	−2	1.00
5	4	−1	1.60
6	4	−1	1.60
7	4	−1	1.00
5	4	0	1.60
6	4	0	1.60
7	4	0	1.00
5	4	1	1.60
6	4	1	1.60
7	4	1	1.00
5	4	2	1.60
6	4	2	1.60
7	4	2	1.00
5	4	3	1.60
6	4	3	1.60
7	4	3	1.00
5	4	4	1.60
6	4	4	1.60
7	4	4	1.00

Literaturverzeichnis

[1] P. Eckle, A. N. Pfeiffer, C. Cirelli, A. Staudte, R. Dörner, H. G. Muller, M. Büttiker, and U. Keller. Attosecond ionization and tunneling delay time measurements in helium. *Science*, 322(5907):1525–1529, 2008.

[2] G. Orlando, C. R. McDonald, N.H. Protik, G. Vampa, and T. Brabec. Tunneling time, what does it mean? *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 47(20):204002, 2014.

[3] L. V. Keldysh. Ionizationin the field of a strong electromagnetic wave. *Soviet Physics JETP*, 20(5):1307, 1965.

[4] Sebastian Werblinski. Wasserstoff im starken Feld. Bachelorarbeit, Humboldt-Universität zu Berlin, 2015.

[5] Alejandro Saenz. *VL Fortgeschrittene Quantentheorie.* Humboldt-Universität zu Berlin, WS 2015/2016.

[6] Walter Greiner. *Theoretische Physik : ein Lehr- und Übungsbuch für Anfangssemester ; mit zahlreichen Beispielen und Aufgaben mit ausführlichen Lösungen. 4. Quantenmechanik ; 1. Einführung.* Verlag Harri Deutsch, Thun, Frankfurt am Main, 4th edition, 1989.

[7] Armin Lühr, Yulian V. Vanne, and Alejandro Saenz. Parameter-free one-center model potential for an effective one-electron description of molecular hydrogen. *Phys. Rev. A*, 78:042510, Oct 2008.

[8] B.R. Junker. Recent computational developments in the use of complex scaling in resonance phenomena. volume 18 of *Advances in Atomic and Molecular Physics*, pages 207 – 263. Academic Press, 1982.

[9] Jakob Bengtsson, Eva Lindroth, and Sølve Selstø. Solution of the time-dependent schrödinger equation using uniform complex scaling. *Phys. Rev. A*, 78:032502, Sep 2008.

[10] WP Reinhardt. Complex coordinates in the theory of atomic and molecular structure and dynamics. *Annual review of physical chemistry*, 33:223–255, 1982.

[11] Y.K. Ho. The method of complex coordinate rotation and its applications to atomic collision processes. *Physics Reports*, 99(1):1 – 68, 1983.

[12] I. W. Herbst and B. Simon. Stark effect revisited. *Phys. Rev. Lett.*, 41:67–69, Jul 1978.

[13] William P. Reinhardt. Method of complex coordinates: Application to the stark effect in hydrogen. *International Journal of Quantum Chemistry*, 10(S10):359–367, 1976.

[14] Alejandro Saenz. Molecular hydrogen exposed to a suddenly turned-on strong electric field or low-frequency laser. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 33(18):3519, 2000.

[15] P. Froelich, B. Jeziorski, W. Kolos, H. Monkhorst, A. Saenz, and K. Szalewicz. Probability distribution of excitations to the electronic continuum of het^+ following the β decay of the t_2 molecule. *Phys. Rev. Lett.*, 71:2871–2874, Nov 1993.

[16] James S. Sims and Stanley A. Hagstrom. High-precision hy–ci variational calculations for the ground state of neutral helium and helium-like ions. *International Journal of Quantum Chemistry*, 90(6):1600–1609, 2002.

[17] Armin Scrinzi. Ionization of multielectron atoms by strong static electric fields. *Phys. Rev. A*, 61:041402, Mar 2000.

[18] Torlina Lisa, Morales Felipe, Kaushal Jivesh, Ivanov Igor, Kheifets Anatoli, Zielinski Alejandro, Scrinzi Armin, Muller Harm Geert, Sukiasyan Suren, Ivanov Misha, and Smirnova Olga. Interpreting attoclock measurements of tunnelling times. *Nat Phys*, 11(6):503–508, Jun 2015.

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet habe.

Berlin, den 10.11.2016

Ingmar Schubert