Biblioteca Digital
F C E N - U B A

BIBLIOTECA CENTRAL LUIS F LELOIR
BIBLIOTECA CENTRAL LELOIR
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES UBA

Tesis de Grado

Algunos aspectos de la teoría cuasiclásica de ionización atómica por efecto túnel

Nuñez Barreto, Nicolás Adrián

2017

Este documento forma parte de las colecciones digitales de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en bibliotecadigital.exactas.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the digital collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in bibliotecadigital.exactas.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:
Nuñez Barreto, Nicolás Adrián. (2017). Algunos aspectos de la teoría cuasiclásica de ionización atómica por efecto túnel. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. https://hdl.handle.net/20.500.12110/seminario_nFIS000071_NunezBarreto

Cita tipo Chicago:
Nuñez Barreto, Nicolás Adrián. "Algunos aspectos de la teoría cuasiclásica de ionización atómica por efecto túnel". Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 2017. https://hdl.handle.net/20.500.12110/seminario_nFIS000071_NunezBarreto

EXACTAS UBA
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

UBA
Universidad de Buenos Aires

Dirección: Biblioteca Central Dr. Luis F. Leloir, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires. Intendente Güiraldes 2160 - C1428EGA - Tel. (++54 +11) 4789-9293

Contacto: bibliotecadigital.exactas.uba.ar

Universidad de Buenos Aires

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física

Algunos aspectos de la teoría cuasiclásica de ionización atómica por efecto túnel

Tesis de Licenciatura en Ciencias Físicas

Nicolás Adrián Nuñez Barreto

Director: Dr. Diego Arbó

Buenos Aires, 2017

TEMA: Algunos aspectos de la teoría cuasiclásica de ionización atómica por efecto túnel.

ALUMNO: Nicolás Adrián Nuñez Barreto

LU N° : 282/12

LUGAR DE TRABAJO: Grupo de Dinámica Cuántica en la Materia - Instituto de Astronomía y Física del Espacio, IAFE (UBA-Conicet).

DIRECTOR DEL TRABAJO: Dr. Diego Arbó, Investigador Independiente CONICET, Instituto de Astronomía y Física del Espacio.

FECHA DE INICIACIÓN: abril de 2017

FECHA DE FINALIZACIÓN: diciembre de 2017

FECHA DE EXAMEN: 22 de diciembre de 2017

INFORME FINAL APROBADO POR:

Autor	Jurado .....
Director	Jurado .....
Profesora de Tesis de Licenciatura	Jurado .....

Resumen

En esta tesis de licenciatura se estudia la dinámica del proceso de fotoionización atómica en el formalismo cuasiclásico. El campo eléctrico del láser distorsiona al potencial atómico formando una barrera de potencial. El átomo se ioniza cuando el electrón atraviesa dicha barrera por efecto túnel. Se muestra que la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo de la mecánica cuántica se puede aproximar como una superposición coherente de trayectorias (al estilo de las integrales de camino de Feynman). Las mismas se denominan trayectorias *cuasiclásicas* debido a que comienzan en un tiempo de ionización en el campo complejo debido a la naturaleza cuántica del efecto túnel, lo cual conlleva a considerar también trayectorias y velocidades complejas.

El trabajo se centra en el estudio de la teoría cuasiclásica, derivando y estudiando las ecuaciones de movimiento del electrón debajo de la barrera y una vez en el continuo, estableciendo similitudes y diferencias con el caso de un átomo sometido a un campo eléctrico estático. Además, se indaga sobre la adiabaticidad del proceso de fotoionización en los regímenes multifotónico y de tuneleo, discutiendo el significado físico de la parte imaginaria del tiempo de ionización, su dependencia con los parámetros del láser y su relación con el tiempo que tarda el electrón en atravesar la barrera.

Palabras claves: Fotoionización, láser, efecto túnel, cuasiclásico, attofísica, adiabaticidad.

Índice general

1. Introducción **7**

1.1. Ionización multifotónica (MPI) 10

1.2. Ionización por efecto túnel 11

2. Efecto túnel. Modelos cuasiclásicos **13**

2.1. Barrera finita de potencial 15

2.2. Ionización con campo eléctrico estático 20

3. Fotoionización atómica debida a un campo eléctrico dependiente del tiempo **25**

3.1. Aproximación de campo fuerte 26

3.2. Aproximación de punto silla 28

4. Dinámica cuasiclásica **33**

4.1. Simple Man's Model 33

4.2. Modelo cuasiclásico 35

4.3. Ionización en máximos de campo eléctrico ($u = 0$) 38

4.3.1. Dinámica bajo la barrera. 39

4.3.2. Distancia recorrida bajo la barrera 40

4.3.3. Tiempo de ionización 41

4.3.4. Energía cinética 41

4.3.5. Tasa de ionización 43

4.4. Ionización fuera de los máximos de campo eléctrico ($u \neq 0$) 45

4.4.1. Dinámica bajo la barrera 47

4.4.2. Energía cinética 52

5. Dinámica semiclásica: interferencias cuánticas de trayectorias **53**

6. Discusión sobre el tiempo de ionización **59**

6.1. Relación del tiempo de ionización con la tasa de ionización 59

6.2. Adiabaticidad de la ionización 61

7. Conclusiones **67**

A. Unidades atómicas **71**

B. Barrera de potencial cuadrada **73**

C. Dinámica de un electrón libre en un campo eléctrico oscilante **75**

D. Amplitud de transición en el gauge de velocidad **77**

Agradecimientos **79**

Bibliografía **81**

Capítulo 1

Introducción

El estudio de la interacción de la radiación electromagnética con la materia ha sido objeto de gran interés en la física especialmente desde el siglo XIX. La formulación de la mecánica cuántica tuvo una fuerte incidencia en dicho estudio, principalmente cuando Einstein dilucidó el efecto fotoeléctrico en 1905. Allí se comenzó a hablar de cuantos de luz, conocidos más tarde como *fotones*. Justamente Einstein fue el que estableció también, en 1915, los fundamentos teóricos para el desarrollo de láseres, los cuales se comenzaron a fabricar recién a finales de los años '50 del siglo pasado. Desde entonces, el desarrollo de láseres pulsados creció enormemente. La duración de los pulsos se ha ido acortando, desde los milisegundos en los comienzos hasta cruzar la barrera de los femtosegundos en la primera década de este siglo, como se muestra en la figura 1.1. Esto hace que hoy en día se puedan estudiar sistemas sometidos a pulsos láser de duraciones del orden de las escalas temporales de los procesos atómicos, esto es, del orden de $10 - 100$ attosegundos [1, 2]. Así se dio comienzo a un nuevo campo de la física denominado *attofísica*, que involucra el estudio de la interacción de pulsos ultracortos con la materia [3, 4, 5, 6, 7].

Al mismo tiempo, la intensidad de los láseres también ha crecido enormemente. La intensidad de los primeros láseres era lo suficientemente baja como para que una teoría perturbativa describiera correctamente los fenómenos de interacción con la materia. Pero, debido a la alta intensidad de los láseres actuales, dicha teoría no es satisfactoria, dando lugar a teorías en el marco de la *física de campo fuerte* [8], asociada estrechamente a la attofísica.

Los primeros desarrollos teóricos sobre átomos en presencia de campos eléctricos intensos

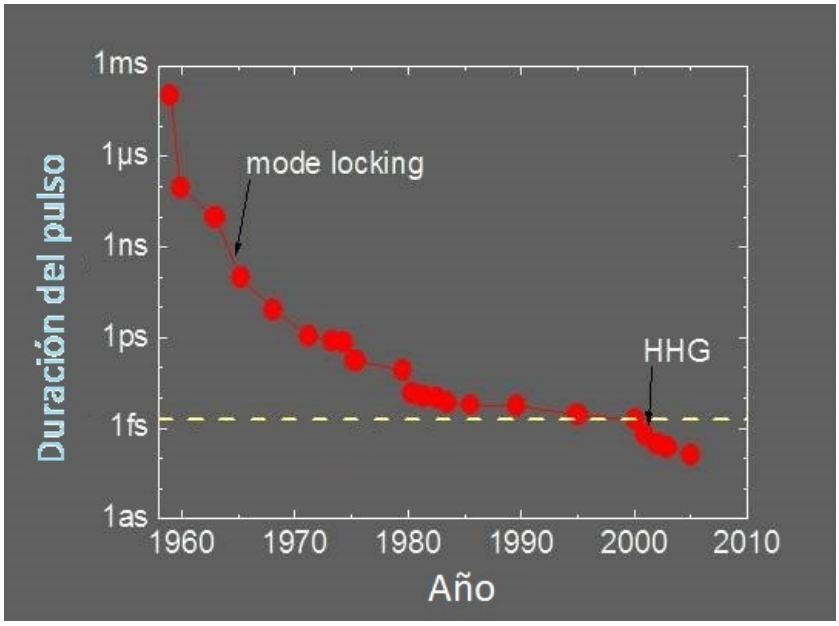

Figura 1.1: Evolución de la duración de los pulsos láser a lo largo del tiempo.

fueron desarrollados alrededor de 1960, algunos incluso antes de la aparición de los primeros láseres. Keldysh, en su trabajo publicado en 1963 titulado *Ionization in the field of a strong electromagnetic wave* [9] dedujo diversas expresiones para las probabilidades de ionización por efecto túnel a través de una barrera de potencial formada por el potencial coulombiano distorsionado por el campo eléctrico oscilante, como se muestra en la figura 1.2. Allí se introdujo un parámetro adimensional que caracteriza el proceso, denominado *parámetro de adiabaticidad*, o *parámetro de Keldysh*

$$\gamma = \frac{\omega}{E_0}\sqrt{2I_p}, \tag{1.1}$$

donde ω representa la frecuencia del campo eléctrico del láser, E_0 es su amplitud e I_p es el potencial de ionización del átomo, es decir, la energía necesaria para que el mismo ionice, siendo $-I_p$ la energía en el estado ligado.

Para entender el rol de este parámetro en la ionización, notemos que podemos deducirlo clásicamente como el cociente del tiempo τ_c que tarda el electrón en recorrer clásicamente una distancia igual al ancho de la barrera viajando a una velocidad clásica v_c, y el período de oscilación del láser $T_0 = \frac{2\pi}{\omega}$ [10], de forma tal que

$$\gamma \propto \frac{\tau_c}{T_0}. \tag{1.2}$$

Si despreciamos el potencial coulombiano, el ancho de la barrera se obtiene al igualar el potencial

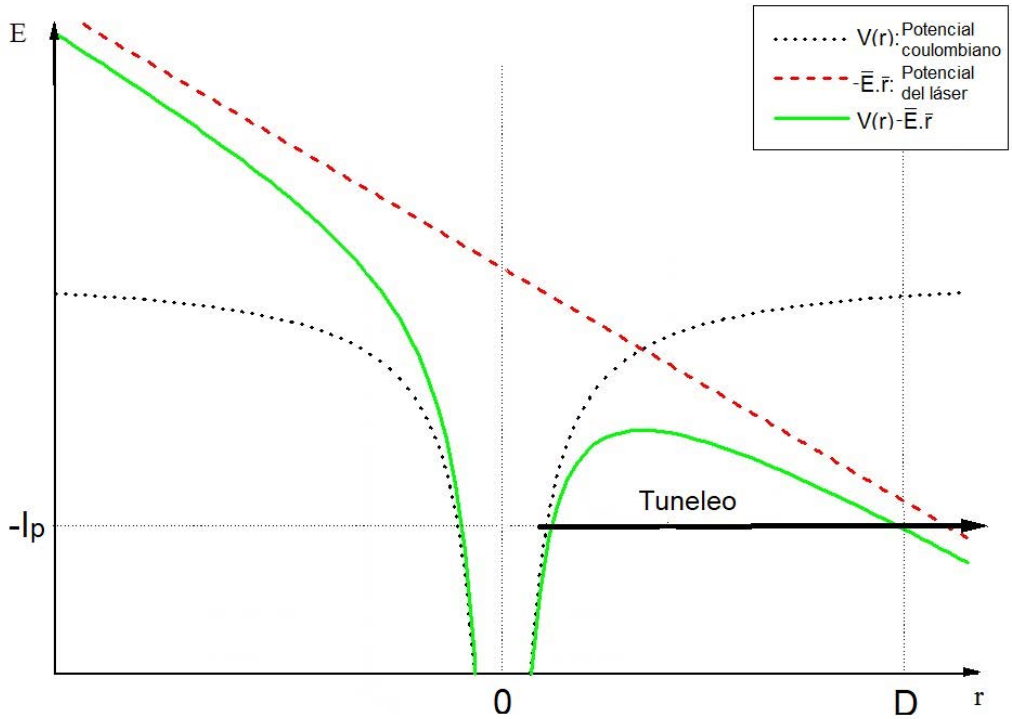

Figura 1.2: Potencial atómico distorsionado por el potencial del láser, dando lugar a una barrera de potencial por la cual el electrón puede escapar por efecto túnel.

del láser $V(r) = \vec{E}.\vec{r}$ con la energía del átomo ligado $-I_p$, obteniendo

$$D_c = \frac{I_p}{E_0}, \tag{1.3}$$

mientras que v_c se halla con el teorema del virial para un sistema con potencial coulombiano

$$< T >= - < E_{\text{tot}} >, \tag{1.4}$$

obteniendo el valor de la *velocidad clásica*

$$v_c = \sqrt{2I_p}. \tag{1.5}$$

Con estas consideraciones, el tiempo clásico se expresa

$$\tau_c = \frac{D_c}{v_c} = \frac{1}{E_0}\sqrt{\frac{I_p}{2}}. \tag{1.6}$$

De esta forma el parámetro de Keldysh divide dos regímenes. Si $\gamma > 1$ la dinámica es dominada por el campo eléctrico, ya que su oscilación es más rápida que el tiempo característico de

tuneleo, y el régimen se denomina *multifotónico*. Por el contrario, si $\gamma < 1$ la dinámica del electrón bajo la barrera es más rápida que el tiempo de oscilación del láser. Bajo esta condición el sistema se encuentra en el régimen de *tuneleo*.

1.1. Ionización multifotónica (MPI)

Para la época de invención del láser los campos eléctricos de los láseres eran muy débiles comparados al campo coulombiano del electrón ligado al núcleo. El régimen con el que se trabajaba era con un parámetro de Keldysh $\gamma >> 1$. En este caso, la distorsión del potencial coulombiano es tan pequeña que la barrera es demasiado ancha como para que el electrón se escape de las vecindades del ion remanente por efecto túnel. En este régimen, el átomo ioniza al absorber una cantidad n de fotones que le permite al electrón alcanzar el continuo con una energía positiva. Por ello, se lo denomina régimen de ionización *multifotónico* (MPI) [11, 12, 13]. Debido a que los campos eléctricos son pequeños en este régimen, la descripción más adecuada de la dinámica en este caso es la teoría de perturbaciones, obteniendo leyes de escala con una dependencia I^n, donde $n = I_p/\omega$ es el número mínimo de fotones que absorbe el sistema e I la intensidad del láser. Se puede ver de esta manera que, debido a que I es muy pequeña, la probabilidad decae exponencialmente con el número de fotones requerido para ionizar, y por ello a mayor n se requieren desarrollos en series de Born a órdenes más altos.

Los primeros experimentos en los que se observaron fenómenos multifotónicos fueron llevados a cabo por Delone et. al. [14], en donde lograron ionizar átomos de Xenón con láseres de rubí, y posteriormente por Agostini et al. [15], ionizando también átomos de Xenón mediante procesos multifotónicos. A fines de 1970 se observó además un fenómeno en el cual el electrón absorbe más fotones de los necesarios para ionizar. A este fenómeno se lo denominó Above Threshold Ionization (ATI) [16, 17]. Estos estudios llevaron a diversas aplicaciones de la ionización multifotónica, como la resonancia MPI (denominada REMPI) [18], muy utilizada en espectroscopías atómicas, y aplicaciones en fotoquímica.

1.2. Ionización por efecto túnel

Con el avance de la tecnología se lograron construir láseres cada vez más intensos, logrando experimentos con parámetros $\gamma \lesssim 1$ [19], por lo que la teoría de perturbaciones dejó de ser un modelo satisfactorio para describir los fenómenos de ionización atómica. Como el campo eléctrico distorsiona en gran parte el potencial Coulombiano, el principal mecanismo de ionización es por efecto túnel [20, 21, 22].

Por otro lado, si el campo eléctrico aplicado al átomo es lo suficientemente intenso, éste lo ionizará debido a que adquirirá un valor de energía superior al de la barrera. Para un átomo de hidrógeno, esto se traduce en intensidades del orden de 10^{16} Wcm^{-2}, por lo que para láseres con intensidades mayores el principal mecanismo de ionización del átomo será por ionización sobre la barrera.

Uno de los resultados más importantes para la tasa de ionización en este régimen fue calculado por *Perelomov, Popov* y *Terent'ev* [23], el cual se lo denomina modelo *PPT*. Posteriormente, una mejora del modelo fue planteada por *Ammosov, Delone* y *Krainov* (*ADK*), en la que se utilizaron números cuánticos efectivos para adaptarlo a mediciones en sistemas moleculares [24]. Ambos modelos fueron muy efectivos al explicar resultados experimentales [10].

Los procesos ultrarrápidos que involucran átomos sometidos a pulsos láser ultracortos se pueden estudiar de diversas maneras. Una de ellas consiste en realizar simulaciones numéricas de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo [25]. Sin embargo, también se han desarrollado modelos semiclásicos [26] y modelos de trayectorias complejas del electrón [27], los cuales permiten realizar interpretaciones físicas de los resultados experimentales. Este último es el enfoque de este trabajo, en donde se estudia un átomo de hidrógeno sometido a un campo eléctrico oscilante linealmente polarizado de duración finita. Aproximamos la solución de la ecuación de Schrödinger para la amplitud de ionización por una superposición de trayectorias, al estilo de las integrales de camino de Feynman [28]. Las denominamos trayectorias *cuasiclásicas* ya que, como el electrón transita la región bajo la barrera, involucran trayectorias, velocidades y tiempos en el campo complejo. Se desarrolla un modelo clásico de trayectorias electrónicas enfocándonos en las trayectorias bajo la barrera, las cuales comienzan en un tiempo de ionización en el campo complejo. La parte imaginaria de dicho tiempo normalmente es

interpretada como el tiempo que transita el electrón bajo la barrera. No obstante, esto es motivo de controversias [29, 30] debido a que existen predicciones teóricas de que el tuneleo se lleva a cabo de forma instantánea [31], a la vez que hay evidencias experimentales de que dicho tiempo es del orden de los 100 as [32, 33, 34]. En este trabajo no se pretende, sin embargo, dar una respuesta concluyente a esta disyuntiva, sino analizar la interpretación en términos del modelo cuasiclásico de trayectorias, estudiando la dependencia del tiempo de ionización con la intensidad y la frecuencia del láser. Finalmente, se realiza un análisis del grado de adiabaticidad del proceso de ionización y de dicho tiempo. A lo largo de todo el trabajo se utilizan unidades atómicas (apéndice A), excepto cuando se indica lo contrario.

Capítulo 2

Efecto túnel. Modelos cuasiclásicos

El efecto túnel es uno de los fenómenos más interesantes y antiintuitivos que provee la mecánica cuántica. Consiste en el hecho de que una partícula cuántica puede atravesar una barrera de potencial a pesar de no tener la energía suficiente para sobrepasarla clásicamente. La partícula posee una probabilidad no nula de ser detectada del otro lado de la barrera, la cual decae típicamente de forma exponencial con el ancho de la misma. A pesar de ello, para barreras lo suficientemente angostas, la probabilidad de transición es apreciable.

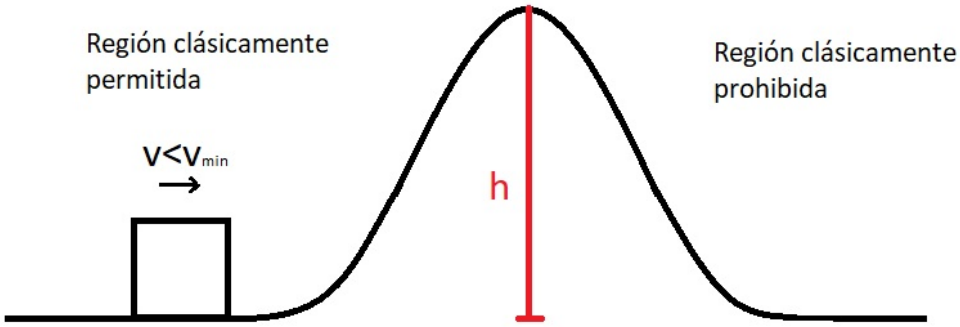

Figura 2.1: Barrera de potencial clásica.

Para ilustrar este fenómeno, consideremos el siguiente ejemplo clásico. Supongamos que un objeto de masa m viaja a velocidad v al ras del piso, ilustrado en la figura 2.1. En cierto punto, hay una colina de altura h. Clásicamente, el objeto logrará atravesar la colina sólo si su energía cinética es al menos suficiente como para llegar a la cima de la misma. Es decir, debe valer

$$\frac{1}{2}mv^2 \geq mgh, \tag{2.1}$$

lo cual lleva a una expresión de velocidad mínima del objeto para atravesar dicha barrera

$$v_{min} = \sqrt{2gh}. \tag{2.2}$$

Si la velocidad del objeto es menor a v_{min}, el mismo no logrará atravesar la colina. Llegará a una cierta altura, y rebotará hacia atrás, estando confinado a la región del espacio delimitada por la barrera. Dicho de otra manera, si la energía cinética inicial del electrón es menor que la energía potencial máxima necesaria para llegar a la cima, el mismo no la atravesará.

Considerando a la partícula desde la mecánica cuántica (por ejemplo, un electrón) su dinámica estaría caracterizada por su función de onda $\Psi(\vec{r})$, de modo tal que la probabilidad diferencial de medir su posición en un determinado sitio es $dP = |\Psi|^2 d\vec{r}$. Esto hace que si el electrón se encuentra ante una barrera de potencial con energía menor al máximo de potencial, exista una probabilidad no nula de hallarlo en la región clásicamente prohibida. Este fenómeno se denomina *efecto túnel*, y es ilustrado en la figura 2.2.

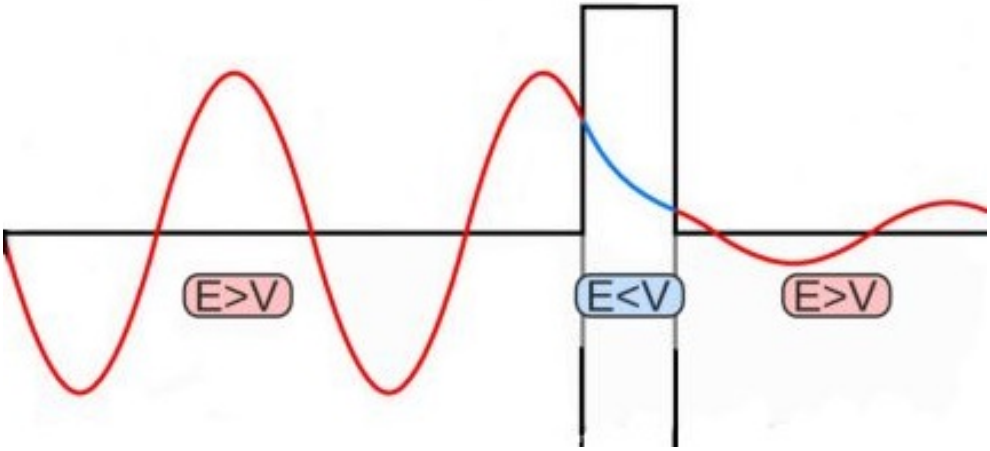

Figura 2.2: Efecto túnel en una barrera de potencial [35].

El efecto túnel es ciertamente un problema para el desarrollo de nanotecnologías. Por ejemplo, impone una limitación física al tamaño de los transistores en electrónica, ya que las dimensiones internas de los mismos son lo suficientemente pequeñas como para que los electrones tuneleen y se generen comportamientos electrónicos impredecibles. A pesar de ello, se están estudiando nuevos tipos de transistores que aprovechen este fenómeno, denominados *Tunnel Field-Effect Transistors* (TFET) [36].

Por otro lado, el efecto túnel está presente en diversos fenómenos físicos naturales, como

decaimientos radiactivos, además de ser uno de los principales mecanismos que dan origen a fusiones nucleares en estrellas. Adicionalmente, hoy en día existen tecnologías que aprovechan este efecto. Un ejemplo se encuentra en las junturas Josephson. Éstas están formadas típicamente por dos superconductores separados por un aislante muy fino, entre los cuales existe una corriente que se genera por efecto túnel. Esto se aprovecha, por ejemplo, en el diseño de magnetómetros llamados SQUID (*Superconducting Quantum Interference Device*), los cuales son magnetómetros con precisiones muy altas, del orden de 10^{-18} T [37]. Además, en el ámbito de la microscopía, en 1981 se desarrolló el microscopio por efecto túnel (STM), que posee resoluciones del orden de $0,01 - 0,1$ nm [38]. En el mismo, existen corrientes eléctricas por efecto túnel entre la superficie a analizar y una punta conductora colocada muy cerca de la misma.

2.1. Barrera finita de potencial

Para comenzar a entender el efecto túnel, estudiaremos el caso más simple que es el de un electrón tuneleando a través de una barrera finita de potencial, ilustrado en la figura 2.3. La

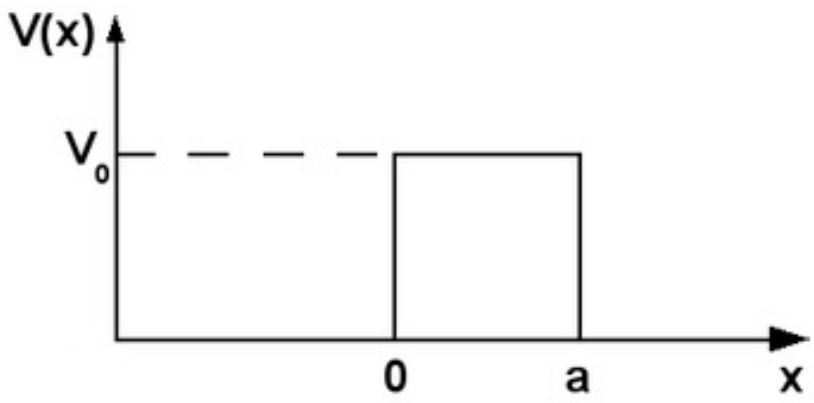

Figura 2.3: Barrera de potencial rectangular.

dinámica está descripta por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo,

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\Psi(x,t). \tag{2.3}$$

En este caso, la expresión del potencial es

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 \leq x \leq a, \\ \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \tag{2.4}$$

En el apéndice B realizamos una descripción detallada de la resolución analítica de este problema.

La idea aquí es realizar un estudio semiclásico del problema para comprender la conexión clásica-cuántica. Planteando una solución de la ecuación de Schrödinger de la forma

$$\Psi(x) = \exp[iS(x,t)], \tag{2.5}$$

y sustituyendo la misma en la ecuación (2.3), se obtiene la siguiente ecuación diferencial para la función $S(x,t)$

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + V(x) - \frac{i}{2}\frac{\partial^2 S}{\partial x^2}. \tag{2.6}$$

La misma es la ecuación clásica de Hamilton-Jacobi para la acción, exceptuando el último término, que es cuántico. De cualquier manera, para potenciales V lineales (o constantes) en la coordenada x, la ecuación admite soluciones también lineales, con lo cual la contribución de este último término es nula. De aquí interpretamos dicha función como la acción clásica de la partícula sometida al potencial $V(x)$.

Si separamos la acción en parte real e imaginaria de forma tal que $S = \mathrm{Re}(S) + i\mathrm{Im}(S)$, la probabilidad de tuneleo será

$$|T|^2 = \exp[-2\mathrm{Im}(S)]. \tag{2.7}$$

Físicamente, esto refiere a que la parte imaginaria de la acción contribuirá a un decaimiento en la probabilidad de transición, mientras que la parte real no contribuye a la misma.

Para la región exterior a la barrera, la solución de la ecuación de Schrödinger es una onda plana, en donde la acción es $S = k_i x$. Podemos interpretar al sistema como una partícula que incide desde la izquierda con momento k_i, coincidente con la velocidad en unidades atómicas. Notemos que la acción es puramente real, lo cual se interpreta como una propagación libre del electrón a la izquierda de la barrera. Posteriormente, la partícula penetra en la barrera. Allí, la

energía cinética de la misma es negativa, y vale

$$\frac{1}{2}k_f^2 = \frac{1}{2}k_i^2 - V_0 < 0, \tag{2.8}$$

en donde k_f es el momento de la partícula bajo la barrera. Dicho momento vale

$$k_f = \pm i\sqrt{2V_0 - k_i^2}, \tag{2.9}$$

y es imaginario. Es decir, la interpretación que realizamos es que el electrón viaja por debajo de la barrera con velocidad imaginaria. Suponiendo que el electrón se halla en posición 0 (i.e. el extremo izquierdo de la barrera) a un tiempo inicial t_i, la ecuación de movimiento para el mismo debajo de la barrera será

$$x(t) = k_f(t - t_i). \tag{2.10}$$

Sin embargo, al emerger de la barrera el mismo recorre una distancia a real. Si tomamos que el electrón emerge a tiempo $t = 0$, es decir, $x(0) = a$, podemos despejar el tiempo t_i como

$$a = k_f(0 - t_i), \tag{2.11}$$

con lo que el tiempo que tarda el electrón en tunelear vale

$$t_i = \pm i\frac{a}{\sqrt{2V_0 - k_i^2}}, \tag{2.12}$$

que también es imaginario, lo cual es consistente con el hecho de que la partícula posee una velocidad imaginaria, pero recorre una distancia real. Esto quiere decir que bajo esta interpretación, la particula recorre la región bajo la barrera en un tiempo imaginario hasta que el mismo se anula y la partícula emerge de la misma. De las dos soluciones de t_i en la ecuación (2.12), una de ellas no tendrá sentido físico debido a que la probabilidad de ionización divergería si $a \to \infty$.

En la figura 2.4 graficamos la posición de la partícula en función del tiempo. Fuera de la barrera, las ecuaciones de movimiento serán

$$x(t) = k_i t, \tag{2.13}$$

antes de penetrar en la barrera ($x < 0$), y

$$x(t) = k_i t + a, \tag{2.14}$$

luego de emerger de la misma ($x > a$). En dichas expresiones se ajustaron las condiciones iniciales para que la función total sea continua. Dentro de la región punteada (entre t_i y 0), el movimiento está regido por la ecuación (2.10) y el tiempo es imaginario. Se puede apreciar que durante éste, el electrón recorre una distancia a igual al ancho de la barrera transitando dicho tiempo imaginario desde t_i hasta 0. Allí, emerge y continúa su propagación con el mismo momento con el que incide.

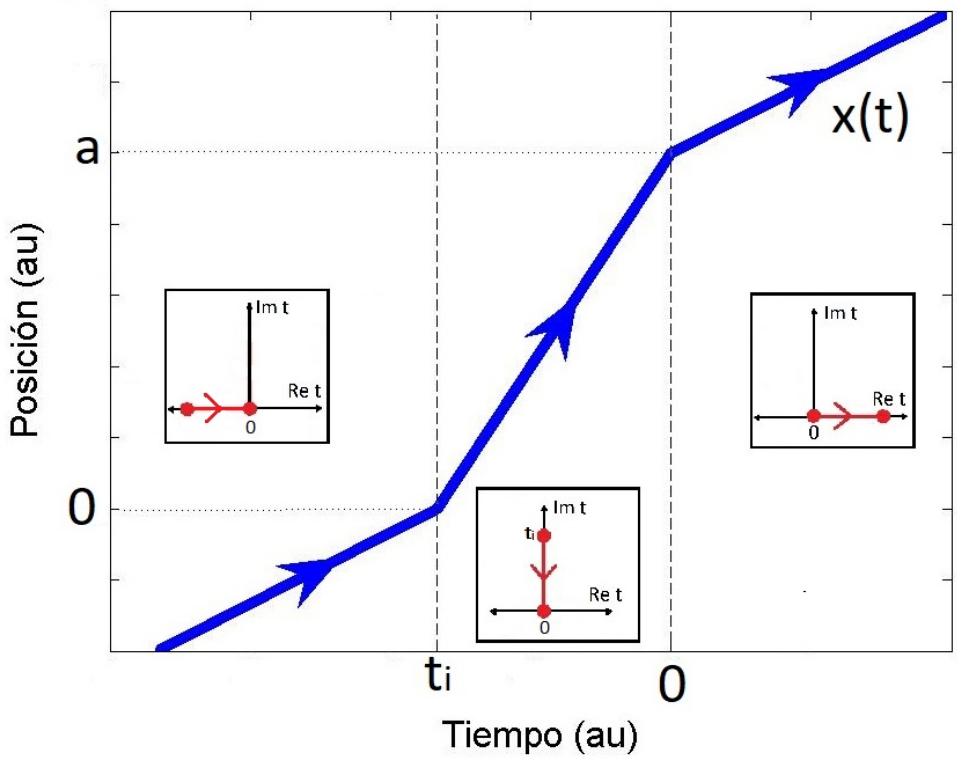

Figura 2.4: Posición en función del tiempo para un electrón tuneleando a través de una barrera cuadrada de ancho a. En cada tramo se grafica además el plano temporal complejo que transcurre durante el movimiento.

Finalmente, procedemos a calcular la acción. Ésta es real fuera de la barrera, por lo cual, por la ecuación (2.7), no contribuirá a la expresión de la probabilidad de transición. Sin embargo, la acción es puramente imaginaria debajo de la misma, i.e.,

$$S = \int_{t_i}^{0} \left(\frac{1}{2} k_i^2 - V_0 \right) dt' - \frac{k_f^2}{2} t_i = \pm i a |k_f|, \tag{2.15}$$

en donde el segundo término es cuántico y se agrega para compatibilizar con la evolución temporal de una partícula con energía total $\frac{1}{2}k_f^2$ de forma tal que la acción en el tiempo de

ionización valga $-\frac{1}{2}k_f^2 t_i$. Allí la solución positiva es la que tendrá sentido físico, ya que la negativa, según la ecuación (2.7), hace que la probabilidad diverja. Finalmente, la probabilidad de transmisión de la partícula es

$$|T|^2 \sim \exp(-2|k_f|a). \tag{2.16}$$

De esta forma se evidencia que la probabilidad de tuneleo para una barrera rectangular decae exponencialmente con el ancho de la barrera. El resultado es idéntico para el primer orden del obtenido con la aproximación semiclásica WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) [39], y posee la misma dependencia exponencial que el resultado analítico exacto (apéndice B). En la figura 2.5

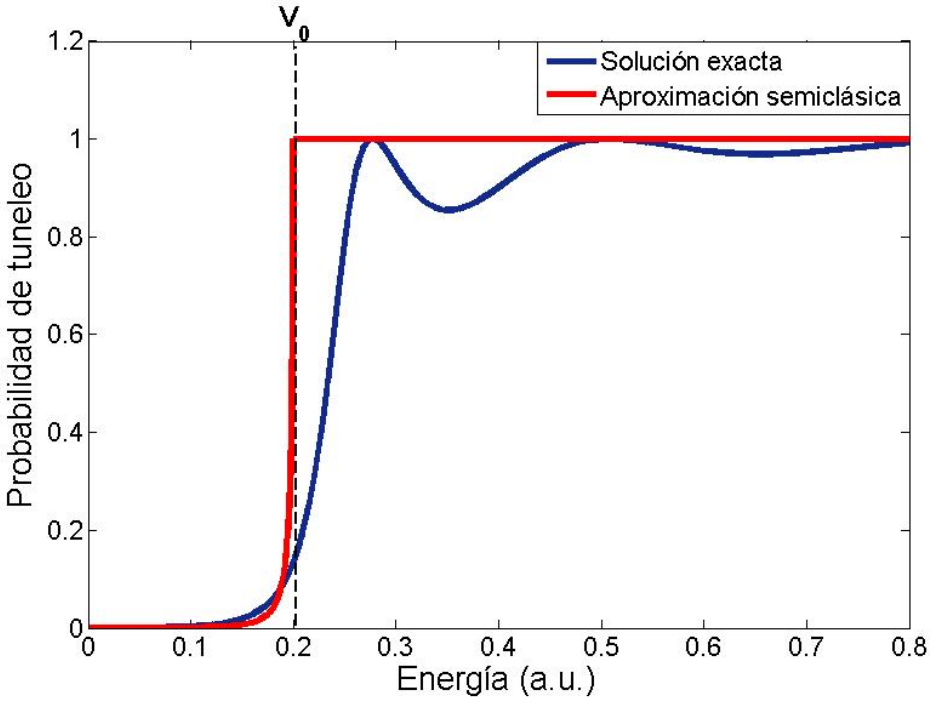

Figura 2.5: Comparación entre la probabilidad de transición semiclásica y la probabilidad exacta. Se utilizaron valores de $V_0 = 0{,}2$ y ancho de la barrera $a = 8$.

se grafica la solución semiclásica de la ecuación (2.16) junto a la solución exacta calculada en el apéndice B. Para energías menores a V_0 el comportamiento es exponencial. Pero para energías mayores a V_0, en la aproximación semiclásica la probabilidad de transición es 1, debido a que la acción será real, y el módulo de la exponencial en la ecuación (2.16) será 1. Por el contrario, en la solución exacta se aprecia un comportamiento oscilatorio evanescente, evidenciando que a pesar de que su energía es superior a la barrera de potencial existe una probabilidad no nula de

rebotar en la misma, el cual es un efecto puramente cuántico. De igual manera, la probabilidad de transmisión tiende a 1 para energías mucho mayores a V_0 como es de esperar.

2.2. Ionización con campo eléctrico estático

Consideremos ahora un electrón en un átomo de hidrógeno, que se encuentra en un estado ligado con energía $-I_p$. El potencial coulombiano es de largo alcance, por lo que no forma ninguna barrera y el electrón permanecerá en dicho estado a menos que el átomo absorba una cantidad de energía igual o mayor a I_p. En dicho caso, el mismo pasa al continuo con momento p, y su función de onda está caracterizada por una onda plana, nomenclada $|p\rangle$ en notación de Dirac.

Si se somete al electrón a un campo eléctrico, la expresión del potencial será

$$V(\vec{r}) = -\frac{1}{r} + \vec{E}.\vec{r}, \tag{2.17}$$

en donde el potencial del láser está expresado en el gauge de longitud (ver apéndice C). De esta manera, el potencial formará una barrera por la que el electrón podrá escapar por efecto túnel, graficada en la figura 1.2.

Una aproximación que utilizaremos a lo largo del trabajo es la *aproximación de campo fuerte* (SFA) [40]. Bajo esta aproximación, asumimos que, antes de la ionización, el electrón ligado está sujeto al potencial atómico despreciando el efecto del láser, mientras que la dinámica de ionización del átomo está regida principalmente por el campo eléctrico, despreciando el potencial coulombiano. Entonces, se puede reemplazar dicho potencial por una delta de Dirac centrada en la ubicación del átomo, graficado en la figura 2.6. De esta manera, expresamos el potencial como

$$V(r) = -\delta(\vec{r}) + \vec{E}.\vec{r}. \tag{2.18}$$

A partir de la expresión anterior podemos determinar el ancho de la barrera D_c que será la distancia clásica que el electrón debe transitar debajo de la barrera al igualar el potencial total a la energía inicial del electrón, obteniendo así el ancho de la barrera dado por la ecuación (1.3).

Estudiemos ahora la dinámica cuasiclásica de un electrón tuneleando en un campo estático $\vec{E} = -E_0\hat{z}$, en donde el signo se agregó para que la barrera se forme para valores de z positivos.

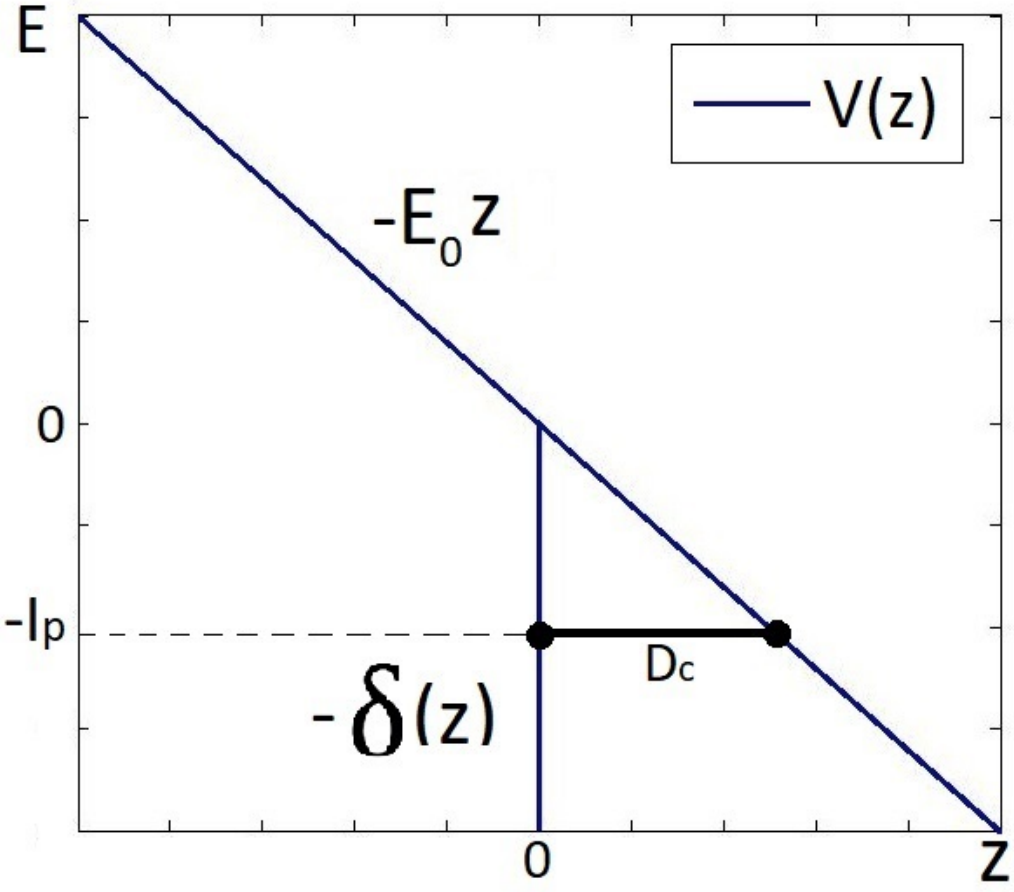

Figura 2.6: Barrera de potencial en la aproximación de campo fuerte.

Suponiendo la dinámica unidimensional a lo largo del eje z, la ecuación de Newton será

$$\ddot{z}(t) = E_0. \tag{2.19}$$

Integramos la ecuación tomando que $\dot{z}(t = 0) = 0$, es decir, que el electrón emerge de la barrera a tiempo 0 con velocidad nula. Con esta condición resulta

$$\dot{z}(t) = E_0 t. \tag{2.20}$$

Ahora realizamos la segunda integral considerando que el electrón ioniza a un tiempo t_i. Al ionizar, el electrón se halla en la posición $z = 0$, centrado en el núcleo. Por ende, tomando $z(t_i) = 0$ se obtiene la trayectoria

$$z(t) = \frac{E_0}{2}(t^2 - t_i^2). \tag{2.21}$$

El tiempo de ionización lo podemos hallar pidiendo que al emerger, es decir, a tiempo $t = 0$, el electrón haya recorrido una distancia igual al ancho de la barrera, dada por la ecuación (1.3), de forma tal que

$$z(t = 0) = \frac{E_0}{2}(0 - t_i^2) = \frac{I_p}{E_0}. \tag{2.22}$$

De esta manera, hallamos el tiempo de ionización

$$t_i = i\frac{\sqrt{2I_p}}{E_0}, \tag{2.23}$$

el cual es imaginario. Evaluando la velocidad del electrón, dada por la ecuación (2.20), en el tiempo de ionización se puede notar que la velocidad en ese instante valdrá

$$\dot{z}(t_i) = i\sqrt{2I_p}, \tag{2.24}$$

y es imaginaria pura, de forma análoga al caso de la barrera cuadrada. Su módulo, a su vez, coincide con la velocidad clásica de la ecuación (1.5). Además, con este resultado la energía total del electrón es continua, ya que, al no poseer energía potencial luego de ionizar, la misma vale

$$\frac{\dot{z}^2(t_i)}{2} = -I_p. \tag{2.25}$$

En la figura 2.7 graficamos la posición del electrón en función del tiempo dada por la ecuación (2.21). En la región a la izquierda de la línea punteada el mismo transita tiempos imaginarios desde t_i hasta 0, en donde emerge habiendo recorrido una distancia $D_c = \frac{I_p}{E_0}$. A partir de allí, el tiempo es real y positivo. Es interesante notar además que de la ecuación (2.21) se deduce que la posición del electrón es real para todo tiempo, aún debajo de la barrera.

Calculemos ahora la acción. Para un potencial de la forma $V = \vec{E}.\vec{r} = -E_0 z$, utilizando las expresiones de velocidad de la ecuación (2.20) junto con la expresión de la trayectoria dada por la ecuación (2.21) el lagrangiano queda expresado como

$$L = T - V = \dot{z}^2 - \frac{E_0^2 t_i^2}{2} = \dot{z}^2 + I_p. \tag{2.26}$$

Con esto, la acción queda expresada como

$$S(t, t_i) = \int_{t_i}^{t} (E_0^2 t'^2 + I_p)dt' + C. \tag{2.27}$$

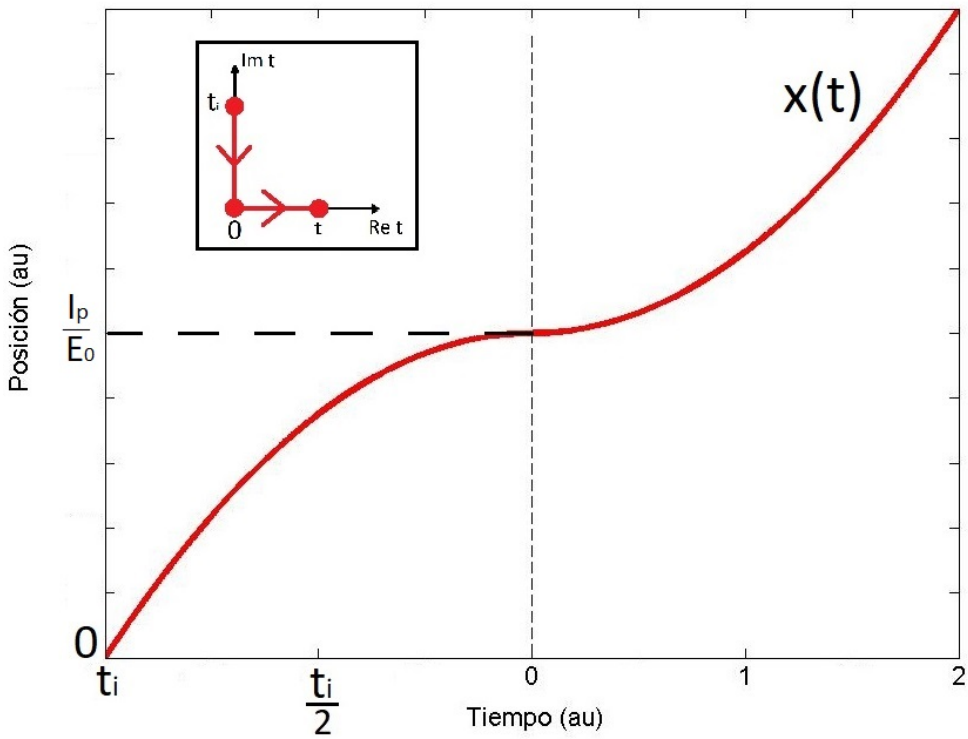

Figura 2.7: Posición en función del tiempo para el electrón, transitando tiempos imaginarios a la izquierda de la línea punteada, y tiempos reales a la derecha.

La constante C se fija pidiendo que la acción del electrón ligado antes de la ionización sea

$$S(t) = I_p t, \tag{2.28}$$

la cual proviene de la evolución temporal del estado atómico ligado. Por ello, al calcular la acción para tiempos posteriores a t_i pedimos que

$$S(t = t_i) = C = I_p t_i, \tag{2.29}$$

por lo que la acción de la ecuación (2.27) queda expresada como

$$S(t, t_i) = \frac{E_0^2}{3}(t^3 - t_i^3) + I_p(t - t_i) + I_p t_i. \tag{2.30}$$

Allí, podemos notar que el agregado de dicha constante es equivalente a restarle a la acción un término igual a la energía total multiplicada por el tiempo de ionización, análogo al caso de la barrera cuadrada. Evaluando en $t = 0$, la acción acumulada debajo de la barrera es finalmente

$$S(t = 0, t_i) = -\frac{E_0^2}{3} t_i^3 = i\frac{1}{3}\frac{(2I_p)^{3/2}}{|E_0|}, \tag{2.31}$$

por lo que la tasa de ionización será

$$|T|^2 = \exp[-2\mathrm{Im}(S)] = \exp\left[-\frac{2}{3}\frac{(2I_p)^{3/2}}{|E_0|}\right]. \tag{2.32}$$

La misma coincide, a menos de un prefactor, con la expresión derivada por Landau [41]. Podemos considerar esta expresión como un caso límite a comparar para un campo eléctrico oscilante en el límite $\omega \to 0$. Además, si consideramos que el campo varía muy lentamente, podríamos considerar en el exponente reemplazar $|E_0|$ por $|E_0 \cos(\omega t)|$ y obtener una primera aproximación para el comportamiento exponencial para ionización con campo oscilante. Aquí subyace el hecho de que la ionización será máxima cuando el campo eléctrico lo sea. Además, la tasa de ionización tenderá a cero exponencialmente para campos muy chicos. Una primera conclusión que se deriva de la ionización con campo eléctrico oscilante es que la mayor parte de la ionización ocurrirá para momentos cercanos a los máximos de campo eléctrico. Por ello, los análisis de tasas de ionización y trayectorias se centrarán en electrones ionizados en dichos tiempos.

Capítulo 3

Fotoionización atómica debida a un campo eléctrico dependiente del tiempo

El objetivo principal de este trabajo es analizar la ionización atómica para un campo eléctrico oscilante. Para resolver en forma cuántica, se plantea la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, bajo la aproximación de *electrón activo simple*, que considera un sólo electrón activo por átomo,

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\Psi(t)\rangle, \tag{3.1}$$

a merced de un potencial efectivo radial $V(r)$ debido a su interacción con el núcleo y el resto de los electrones, como también del campo eléctrico del láser $\vec{E}(t)$. La ecuación 3.1 considera que la intensidad del láser es lo suficientemente alta como para tratar al átomo en forma cuántica y al campo eléctrico de forma clásica. Esto se debe a que el número de fotones del campo eléctrico del láser es muy grande comparado con el número de fotones absorbido por el átomo.

En el gauge de longitud (ver apéndice C), el hamiltoniano se escribe

$$H = \underbrace{\frac{\vec{p}^2}{2} + V(r)}_{H_0} + \underbrace{\vec{E}(t).\vec{r}}_{H_i}, \tag{3.2}$$

donde H_0 es el hamiltoniano atómico, con momento $\vec{p}$ y potencial coulombiano $V(r)$, y H_i es el hamiltoniano de interacción con el campo eléctrico en la aproximación dipolar, la cual considera que la longitud de onda es mucho mayor a las dimensiones atómicas. El hamiltoniano de interacción cumple que $\lim_{t\to\pm\infty} H_i = 0$, ya que el pulso láser tiene una duración finita.

Las soluciones del hamiltoniano atómico cumplen

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\Phi(t)\rangle = \hat{H}_0(t)|\Phi(t)\rangle, \tag{3.3}$$

y se suponen bien conocidas. Si consideramos la solución $|\Psi_f^-\rangle$ de la ecuación (3.1) tal que $\lim_{t\to\infty}|\Psi_f^-\rangle = |\Phi_f\rangle$, y tomando $|\Phi_i\rangle$ como el estado inicial solución de la ecuación (3.3), podemos escribir la amplitud de transición como

$$T = \lim_{t\to-\infty}\langle\Psi_f^-(t)|\Phi_i(t)\rangle. \tag{3.4}$$

Utilizando integración por partes se obtiene

$$T = -i\int_{-\infty}^{+\infty} dt\langle\Psi_f^-(t)|H_i|\Phi_i(t)\rangle, \tag{3.5}$$

la cual es una expresión exacta para la amplitud de transición si $|\Psi_f^-\rangle$ es exacta.

3.1. Aproximación de campo fuerte

La ecuación (3.5) no es más que un mero hecho ilustrativo con ninguna practicidad, ya que es necesario conocer la solución de la ecuación (3.1) para calcular el elemento de matriz de transición T, y la misma no tiene una solución analítica. Un posible método para resolverla es de forma numérica [25]. Sin embargo, el método que usaremos en este trabajo será aproximar dicha solución por un estado de Volkov, el cual es un autoestado del hamiltoniano de un electrón libre en presencia de un campo eléctrico (desarrollado en el apéndice C). De esta forma, estamos asumiendo que la dinámica del electrón en el continuo se rige únicamente por el campo eléctrico, despreciando los efectos del potencial coulombiano. La expresión del estado de Volkov en el gauge de longitud es

$$\Psi_p^V(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{-iS_L(p,t,t')}e^{i[\vec{p}+\vec{A}(t)].\vec{r}}, \tag{3.6}$$

donde $\vec{A}(t)$ es el potencial vector que cumple $\vec{E}(t) = -\frac{\partial\vec{A}(t)}{\partial t}$, y

$$S_L(\vec{p},t,t') = \frac{1}{2}\int_{t'}^{t}[\vec{p}+\vec{A}(t'')]^2dt'' \tag{3.7}$$

es la acción clásica de un electrón libre en presencia de un campo eléctrico externo de modo tal que se cumple la relación

$$\vec{p} = \dot{\vec{r}}(t) - \vec{A}(t), \tag{3.8}$$

donde $\vec{p}$ es una constante de movimiento y es el momento generalizado del electrón, y $\dot{\vec{r}}(t)$ es la velocidad del electrón. Además, al ser un problema típico de scattering, se suele considerar $t' \to -\infty$.

Por otro lado, el estado inicial $|\Phi_i(t)\rangle$ evoluciona temporalmente con energía $-I_p$ de la forma

$$|\Phi_i(t)\rangle = e^{iI_p t}|\Phi_g\rangle, \tag{3.9}$$

en donde $|\Phi_g\rangle$ es el estado fundamental atómico. Con la expresión del estado de Volkov en el canal final, dada por la ecuación (3.6), podemos escribir la probabilidad de transición de la ecuación (3.5) como

$$T = -i\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-iS(p,t,t')}\langle\vec{p}+\vec{A}(t)|H_i|\Phi_g\rangle, \tag{3.10}$$

donde la fase

$$S(p,t,t') = \int_{t'}^{t}\left(I_p + \frac{1}{2}[\vec{p}+\vec{A}(t'')]^2\right)dt'' \tag{3.11}$$

es la acción clásica de un electrón en un campo eléctrico inicialmente con energía $-I_p$. Podemos apreciar que bajo esta aproximación la amplitud de transición es del estilo de las integrales de camino de Feynman. La acción involucra trayectorias electrónicas que interfieren entre sí y la probabilidad es igual a la superposición coherente de todas ellas.

El factor que acompaña a la exponencial en la ecuación (3.10) tiene una expresión analítica para el átomo de hidrógeno. Utilizando la expresión para el estado fundamental, la misma es

$$\langle\vec{p}+\vec{A}(t)|H_i|\Phi_g\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}\pi}\frac{(2I_p)^{5/4}}{\left[I_p + \frac{1}{2}|\vec{p}+\vec{A}(t)|^2\right]}. \tag{3.12}$$

Con esto, la expresión para la amplitud de transición es

$$T = i\frac{(2I_p)^{5/4}}{\sqrt{2}\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dt\frac{e^{-iS(p,t,t')}}{I_p + \frac{1}{2}|\vec{p}+\vec{A}(t)|^2}. \tag{3.13}$$

Considerando un campo eléctrico en la dirección $\hat{z}$, el denominador del integrando se puede reescribir como

$$\underbrace{I_p + \frac{p_\rho^2}{2}}_{\tilde{I}_p} + \frac{1}{2}[p_z + A(t)]^2 = \tilde{I}_p + \frac{1}{2}[p_z + A(t)]^2 = \frac{\partial S(t)}{\partial t}, \tag{3.14}$$

en donde $\tilde{I}_p = I_p + \frac{p_\rho^2}{2}$. Esto quiere decir que tener un momento perpendicular al campo no nulo es análogo a incrementar el potencial de ionización.

3.2. Aproximación de punto silla

El argumento de la exponencial en la ecuación (3.13) oscila muy rápidamente. Por ello, la integral es dominada por los tiempos en los cuales la fase es localmente estacionaria. Con esta consideración se puede aproximar la integral por una sumatoria sobre dichos tiempos. Ésta se denomina *aproximación de punto silla* (SPA), y está basada en la aproximación de fase estacionaria [42]. Dichos tiempos, notados t_{SP}, serán interpretados como los tiempos de ionización, y cumplen la ecuación de punto silla

$$\left.\frac{\partial S}{\partial t}\right|_{t_{SP}} = \frac{1}{2}\left[p_z + A(t_{SP})\right]^2 + \tilde{I}_p = 0. \tag{3.15}$$

Notemos que, a diferencia de los casos estudiados previamente, ahora tenemos más de un tiempo de ionización, etiquetados con el subíndice SP, si consideraremos que el potencial vector $\vec{A}(t)$ es sinusoidal con N ciclos. Entonces, la integral de la ecuación (3.13) se puede aproximar como

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{e^{-iS(p,t,t')}}{\dot{S}(t)} \simeq i\pi \sum_{SP} \frac{e^{-iS(t_{SP})}}{\ddot{S}(t_{SP})}. \tag{3.16}$$

La expresión de la segunda derivada de la acción $\frac{\partial^2 S(t_{SP})}{\partial t^2}$ es

$$\ddot{S}(t_{SP}) = [p_z + A(t_{SP})]E(t_{SP}) = \sqrt{2\tilde{I}_p}|E(t_{SP})|, \tag{3.17}$$

donde hemos usado la ecuación de punto silla 3.15. Entonces la expresión final de la amplitud de transición queda

$$T = -i\frac{(2I_p)^{5/4}}{2\sqrt{\tilde{I}_p}} \sum_{SP} \frac{e^{-iS(t_{SP})}}{|E(t_{SP})|}, \tag{3.18}$$

en donde la sumatoria se realiza sobre todos los tiempos de ionización. Esta expresión es válida en el gauge de longitud. Para el gauge de velocidad, su expresión es ligeramente distinta (apéndice D), lo cual evidencia que la aproximación de campo fuerte no es invariante de gauge. Ambas expresiones difieren únicamente en un prefactor, por lo que la dependencia exponencial de la matriz de transición es la misma en ambos gauges.

En la ecuación (3.18) la sumatoria se realiza sobre la acción de trayectorias electrónicas semiclásicas, es decir, trayectorias de electrones que ionizan en los tiempos de ionización t_{SP} las cuales son soluciones de la ecuación (3.15). Dichas trayectorias son las que minimizan la acción,

por lo cual, en la interpretación de Feynman, serán las trayectorias clásicas más probables. Sin embargo, son denominadas semiclásicas debido a que, al sumar la contribución de todas las trayectorias, obtendremos interferencias cuánticas, constructivas y destructivas, entre ellas.

Para calcular dichos tiempos, consideremos un campo eléctrico linealmente polarizado de la forma $\vec{E} = E_0 \cos(\omega t)\hat{z}$, en donde el potencial vector vale $\vec{A} = -\frac{E_0}{\omega}\sin(\omega t)\hat{z}$. Definimos

$$u = p_z \frac{\omega}{E_0} \tag{3.19}$$

como la componente paralela al campo del momento generalizado del electrón en su forma adimensionalizada. De esta manera la ecuación (3.15) se expresa

$$[u - \sin(\omega t_{SP})]^2 = -\tilde{\gamma}^2, \tag{3.20}$$

en donde

$$\tilde{\gamma}^2 = \frac{w^2}{E_0^2} 2\tilde{I}_p = \gamma^2 + \frac{p_\rho^2 \omega^2}{E_0^2}, \tag{3.21}$$

siendo γ el parámetro de Keldysh discutido en la introducción, el cual aparece naturalmente en este formalismo.

Para cada valor de u existen dos soluciones por cada ciclo óptico debido a que la función seno adquiere dos valores iguales en cada período. Debido a ello, los tiempos de ionización se notan $t_{SP} = t_m^{(\alpha)}$, en donde $m = 1, ..., N$ indica el número del ciclo óptico y $\alpha = 1, 2$ denota a los dos tiempos por cada ciclo. Estas soluciones representan los tiempos en que la acción del electrón es estacionaria, y dominan la ionización. Llamaremos $t_i = t_0 + i\tau_T$ a una de las soluciones para el primer ciclo óptico ($m = \alpha = 1$). Para los demás ciclos, etiquetados con el subíndice m, la solución es $t_m^{(1)} = t_i + \frac{2\pi m}{\omega}$, con $1 \leq m \leq N$. La segunda solución en el mismo ciclo óptico vale $t_m^{(2)} = \frac{\pi}{\omega} - t_m^{(1)*}$.

Si restringimos a $p_\rho = 0$ la ecuación (3.20) queda expresada

$$\sin(\omega t_i) = u + i\gamma. \tag{3.22}$$

Para generalizar, simplemente se reemplaza I_p por $\tilde{I}_p$. De la ecuación (3.22) se deduce que la expresión formal más general para las soluciones de la ecuación es

$$t_i = \frac{1}{\omega}\sin^{-1}(u + i\gamma). \tag{3.23}$$

Para despejar las partes real y la imaginaria separamos el seno de un número complejo y obtenemos dos ecuaciones

$$\begin{cases} \sin(\omega t_0)\cosh(\omega\tau_T) = u, \\ \cos(\omega t_0)\sinh(\omega\tau_T) = \gamma, \end{cases} \tag{3.24}$$

en donde consideramos $t_i = t_0 + i\tau_T$. En primer lugar, para comprender el rol de cada componente del tiempo complejo supongamos que ambas partes, real e imaginaria del mismo, son pequeñas. Eso lleva a que

$$t_0 + i\tau_T \simeq \frac{1}{\omega}(u + i\gamma), \tag{3.25}$$

lo cual muestra que hay dos fuertes relaciones. Por un lado, la parte real del tiempo se relaciona con el momento paralelo del electrón. Por otro lado, la parte imaginaria tiene una fuerte conexión con el parámetro de Keldysh y será la principal protagonista de la dinámica de ionización debajo de la barrera. Además, la misma se relaciona con el momento perpendicular p_ρ al generalizar $\gamma \to \tilde{\gamma} = \sqrt{\gamma^2 + \frac{\omega^2}{E_0^2}p_\rho^2}$.

La componente en $\hat{z}$ de la ecuación (3.8), recordando que u es la componente del momento generalizado adimensionalizado paralela al campo, queda expresada

$$p_z = u\frac{E_0}{\omega} = \dot{z}(t) - A(t). \tag{3.26}$$

Esto implica que si $u = 0$ la ionización ocurre en los máximos del campo eléctrico, siendo un caso de gran importancia según lo expresado en la ecuación (2.32).

En particular, si $u = 0$, mediante la ecuación (3.23) el tiempo de ionización queda puramente imaginario, y su expresión es

$$t_i = i\tau_T = i\frac{\sinh^{-1}\gamma}{\omega} = i\frac{\ln(\gamma + \sqrt{\gamma^2 + 1})}{\omega}. \tag{3.27}$$

Como la mayor parte de la ionización ocurre con $u = 0$, podríamos tomar una aproximación de las ecuaciones para los tiempos con $|u| << 1$, es decir, $|p_z| << E_0/\omega$. Como vimos, existe una fuerte relación entre la parte real de t_i y u. Por ello, aproximar a primer orden en u implica aproximar ωt_0 al mismo orden. Entonces, a primer orden, $\sin(\omega t_0) \simeq \omega t_0$, y $\cos(\omega t_0) \simeq 1$, por lo que

$$\begin{cases} \omega t_0 \cosh(\omega\tau_T) = u, \\ \sinh(\omega\tau_T) = \gamma. \end{cases} \tag{3.28}$$

La solución del tiempo de ionización es entonces

$$t_i = \frac{u}{\omega\sqrt{1+\gamma^2}} + i\frac{\sinh^{-1}\gamma}{\omega} = \frac{p_z}{E_0\sqrt{1+\gamma^2}} + i\frac{\ln(\gamma+\sqrt{\gamma^2+1})}{\omega}. \tag{3.29}$$

Dicha ecuación nos da una corrección para el valor de la parte real del tiempo de ionización respecto al caso $u = 0$ pero no para la parte imaginaria, la cual tendría correcciones recién a segundo orden en u, las cuales despreciamos.

Capítulo 4

Dinámica cuasiclásica

En este capítulo estudiamos la dinámica cuasiclásica de los electrones para un campo eléctrico oscilante, resolviendo la ecuaciones de Newton para el sistema. Debido a la simetría cilíndrica del sistema, reducimos el problema de tres dimensiones a dos dimensiones, tomando la coordenada z como la paralela a la dirección de polarización del campo eléctrico y la coordenada ρ como la perpendicular. Consideramos en este caso un campo eléctrico linealmente polarizado de la forma

$$\vec{E}(t) = E_0 \cos(\omega t)\hat{z}. \tag{4.1}$$

4.1. Simple Man's Model

Un modelo simple que trata la dinámica cuasiclásica de fotoionización en el régimen de tuneleo es el denominado *Simple Man's Model* (SMM). El mismo postula que la ionización es instantánea y ocurre a un tiempo t_0 real, con una tasa de ionización semiclásica dada por el modelo ADK [24]. Allí, el electrón emerge de la barrera con velocidad nula en el origen, es decir, en $\vec{r} = 0$, por lo que considera un ancho de la barrera nulo. A partir de allí, la dinámica es clásica, regida únicamente por el campo eléctrico, despreciando el efecto del potencial coulombiano del núcleo.

La ecuación de Newton para el movimiento paralelo al campo se expresa

$$\ddot{z}(t) = -E_0 \cos(\omega t). \tag{4.2}$$

Integrando dicha ecuación con la condición inicial $\dot{z}(t = t_0) = 0$, la expresión para la velocidad queda

$$\dot{z}(t) = -\frac{E_0}{\omega}\left[\sin(\omega t) - \sin(\omega t_0)\right]. \tag{4.3}$$

La velocidad media a lo largo de un ciclo del láser con la que se propaga el electrón vale entonces

$$< \dot{z}(t) >= \frac{E_0}{\omega}\sin(\omega t_0) \equiv v_D, \tag{4.4}$$

y se la denomina *velocidad de deriva*. Con esta definición, la expresión de la enegía cinética es

$$T(t) = \frac{E_0^2}{2\omega^2}\sin^2(\omega t) + \frac{v_D^2}{2} - \frac{E_0}{\omega}v_D\sin(\omega t), \tag{4.5}$$

y su valor medio temporal vale

$$< T >= \frac{E_0^2}{4\omega^2} + \frac{v_D^2}{2} \equiv U_p + \frac{v_D^2}{2}. \tag{4.6}$$

Allí definimos la *energía ponderomotriz* $U_p \equiv \frac{E_0^2}{4\omega^2}$ como el valor promedio de energía que adquiere el electrón en un ciclo del láser. Cuando el electrón llega al detector, ubicado en el infinito[1], la energía que se mide es $T = \frac{v_D^2}{2}$, ya que el electrón no oscila más después de que se apaga el láser. De la ecuación (4.4) es fácil comprobar que dicha energía cinética es menor a dos veces la energía ponderomotriz, i.e., $T \leq 2U_p$. Dicha cota se denomina *energía de corte*. Sin embargo, a mediados de los 90, al considerarse procesos de recolisión se corrigió este valor de energía hasta energías de corte del orden de $10U_p$ [43, 44].

Finalmente, integrando la ecuación (4.3) considerando $z(t = t_0) = 0$, la ecuación para la trayectoria es

$$z(t) = \frac{E_0}{\omega^2}\left[\cos(\omega t) - \cos(\omega t_0)\right] + v_D(t - t_0). \tag{4.7}$$

Si consideramos que el electrón ioniza en un máximo del campo eléctrico, es decir, $t_0 = 0$, por la ecuación (4.4) vale que $v_D = 0$, con lo que la trayectoria queda expresada

$$z(t) = \frac{E_0}{\omega^2}\left[\cos(\omega t) - 1\right], \tag{4.8}$$

y su valor medio es

$$< z(t) >= -\frac{E_0}{\omega^2} \equiv -\alpha, \tag{4.9}$$

[1]El detector ubicado en el infinito refiere a que se halla a una distancia del átomo mucho mayor que las dimensiones atómicas características, en donde el campo eléctrico se encuentra apagado.

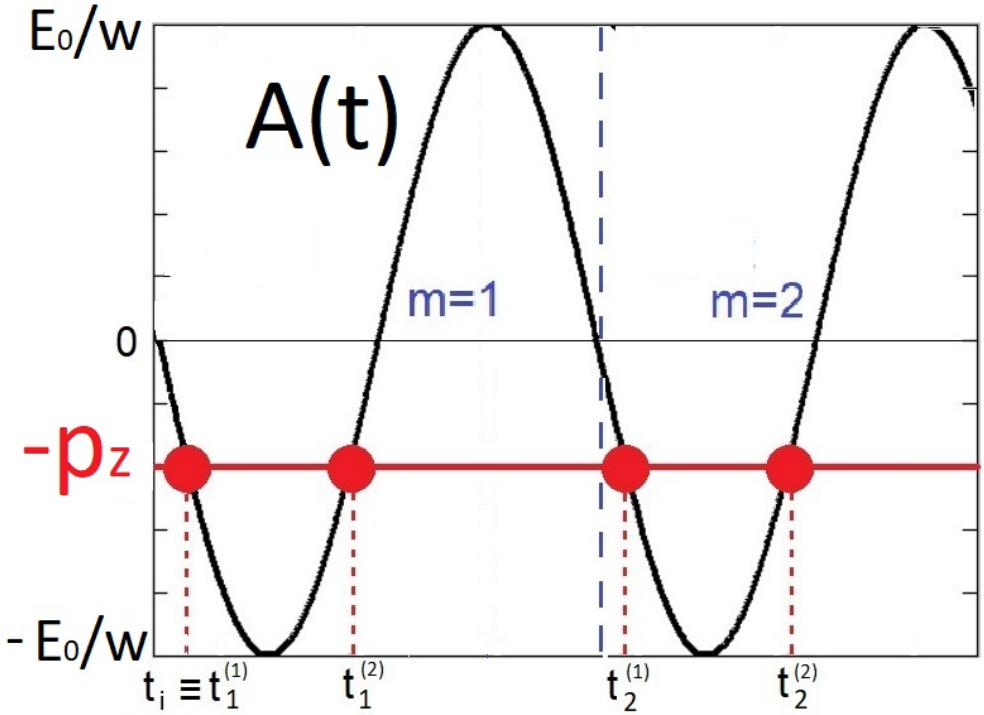

Figura 4.1: Tiempos de ionización por cada ciclo óptico.

en donde α se denomina *amplitud de oscilación.*

El Simple Man's Model considera que el potencial de ionización es $I_p = 0$. Es por ello que el ancho de la barrera en este caso es nulo. Por ello, con la ecuación (3.15) los tiempos de ionización de este modelo son los que cumplen la relación

$$A(t_m^{(\alpha)}) = -p_z. \tag{4.10}$$

En la figura 4.1 graficamos dichos tiempos, evidenciando que hay dos por cada ciclo del láser.

Ahora procederemos a realizar una mejora a este modelo, partiendo de condiciones iniciales más realistas al considerar el recorrido del electrón bajo la barrera.

4.2. Modelo cuasiclásico

Procedemos a plantear las ecuaciones de Newton para el movimiento del electrón considerando como tiempos de ionización las soluciones de la ecuación de punto silla (3.15), o equivalentemente, la ecuación (3.23). La interpretación que realizamos de los tiempos de ionización

complejos $t_i = t_0 + i\tau_T$ en el contexto del modelo cuasiclásico planteado en este trabajo es la siguiente:

1. El electrón no es afectado por el campo eléctrico del láser hasta un tiempo igual a la parte real del tiempo de ionización. Es decir, para $t < t_0$ el electrón permanece en su estado ligado con energía $-I_p$.

2. Luego, a tiempo t_i el átomo comienza a ionizarse, y mientras transcurre tiempo complejo, manteniendo su parte real t_0 constante, la parte imaginaria disminuye desde τ_T hasta 0. El electrón transita la región bajo la barrera (primer tramo en la figura 4.2).

3. Al anularse la parte imaginaria del tiempo, el electrón emerge de la barrera y continúa su dinámica con tiempo real $t \geq t_0$ influenciado únicamente por el campo eléctrico del láser, de acuerdo a la aproximación de campo fuerte (segundo tramo en la figura 4.2).

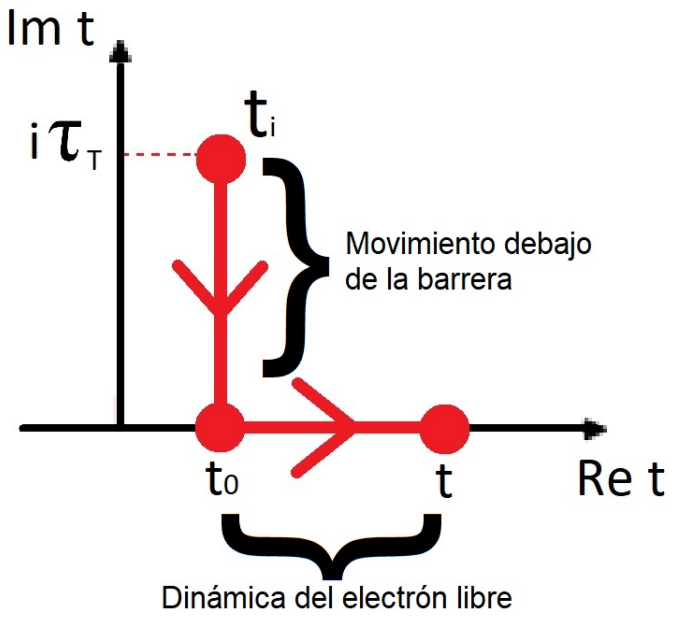

Figura 4.2: Plano complejo temporal.

Los tiempos de ionización tienen su rol en las condiciones iniciales desde las cuales integramos la ecuación de Newton. Se obtienen trayectorias a partir del instante t_i en que el electrón comienza a transitar bajo la barrera, es decir, su evolución a partir de dichos tiempos. Debido a que consideramos tiempos complejos, es inherente a la dinámica del proceso de ionización

que el electrón posea, transitoriamente mientras atraviesa la barrera de potencial, trayectorias y momentos complejos. La razón fundamental de ello es que, cuando el electrón se halla bajo la barrera de potencial, la energía cinética del mismo es negativa, lo cual lleva a considerar necesariamente, dentro de la dinámica cuasiclásica, velocidades imaginarias. A pesar de todo esto, es necesario que dichos valores sean reales para el movimiento fuera de la barrera, de acuerdo a la mecánica clásica tradicional.

Resolvemos para un campo eléctrico en la aproximación dipolar polarizado linealmente en la dirección $\hat{z}$ dado por la ecuación (4.1). La dinámica para la coordenada perpendicular ρ es trivialmente $\ddot{\rho} = 0$, lo que lleva a considerar al momento perpendicular del electrón $\dot{\rho} = p_\rho$ como una constante de movimiento.

La ecuación de Newton para la coordenada z con la que trabajaremos es la ecuación (4.2) Dicha ecuación expresa la aceleración del electrón en función del tiempo bajo la influencia del campo eléctrico una vez que despreciamos la fuerza de Coulomb ejercida por el núcleo. Entonces, podemos analizar la aceleración bajo la barrera parametrizando el tiempo complejo bajo la barrera $t = t_0 + i\tau$ con $0 \leq \tau \leq \tau_T$. Así, obtenemos que el electrón está sometido a una fuerza compleja de la forma

$$\ddot{z}(t_0 + i\tau) = -E_0 \cos[\omega(t_0 + i\tau)] = -E_0 \cos(\omega t_0)\cosh(\omega\tau) + iE_0 \sin(\omega t_0)\sinh(\omega\tau). \tag{4.11}$$

Podemos apreciar aquí que, bajo la barrera, el electrón está sometido a una fuerza con componente imaginaria no nula. Es de esperar, por ende, que el mismo describa trayectorias y velocidades complejas.

Primero, resolvemos la ecuación (4.2) para un valor de momento paralelo p_z arbitrario. Según la ecuación (3.26), la expresión de la velocidad del electrón es

$$\dot{z}(t) = p_z + A(t) = p_z - \frac{E_0}{\omega}\sin(\omega t). \tag{4.12}$$

Con estas consideraciones, calculamos la trayectoria integrando la ecuación (4.12). Aquí tomamos que el electrón en el tiempo de ionización se encuentra en el origen, ya que la aproximación de campo fuerte es equivalente a reemplazar el potencial coulombiano por una delta de Dirac centrada en $z = 0$ (ver figura 2.6). Por ende, tomamos $z(t = t_i) = 0$. Finalmente, integrando la ecuación (4.12), la expresión de la trayectoria es

$$z(t) = p_z(t - t_i) - \frac{E_0}{\omega}\int_{t_i}^{t} \sin(\omega t')dt'. \tag{4.13}$$

Ahora procedemos a calcular las trayectorias y velocidades, particularizando para los casos en que el momento paralelo es cero ($u = 0$), y el momento paralelo es distinto de cero pero pequeño ($|u| << 1$), que son los que dominan la dinámica de la ionización ya que refieren a ionización en tiempos cercanos a los máximos de campo eléctrico.

4.3. Ionización en máximos de campo eléctrico ($u = 0$)

El caso $u = 0$, es decir, $p_z = 0$, implica que los electrones que emergen de la barrera en los máximos de campo eléctrico lo hacen con momento final nulo. Con la ecuación (4.12), la expresión de la velocidad es

$$\dot{z}(t) = -\frac{E_0}{\omega}\sin(\omega t). \tag{4.14}$$

Para este caso, el tiempo de ionización es puramente imaginario y vale $t_i = i\tau_T$, en donde $\tau_T = \frac{\sinh^{-1}\gamma}{\omega}$. Por ello, la ecuación (4.13) se expresa

$$z(t) = -\frac{E_0}{\omega}\int_{i\tau_T}^{t}\sin(\omega t')dt', \tag{4.15}$$

integrando desde un valor imaginario hasta un valor real. La integral de la ecuación (4.15) se calcula mediante un camino que recorra el eje imaginario, desde $i\tau_T$ hasta 0, y luego el eje real desde 0 hasta t, como el descripto en la figura 4.2 tomando $t_0 = 0$. Por ende, dividimos la integral en dos partes,

$$\int_{i\tau_T}^{t}\sin(\omega t')dt' = \int_{i\tau_T}^{0}\sin(\omega t')dt' + \int_{0}^{t}\sin(\omega t')dt'. \tag{4.16}$$

Mediante una sustitución en la primera integral, considerando $\xi = it'$ y renombrando a la variable de integración t', se muestra que es posible escribir la integral como

$$z(t) = -\frac{E_0}{\omega}\left[\int_{0}^{\tau_T}\sinh(\omega t')dt' + \int_{0}^{t}\sin(\omega t')dt'\right]. \tag{4.17}$$

Este resultado es una muestra de que el electrón transita, durante un tiempo igual a la parte imaginaria del tiempo de ionización, una distancia que es, en principio, la distancia recorrida por el electrón bajo la barrera. La misma es una distancia efectiva dada por el hecho de que la barrera no es estática, sino que oscila en el tiempo. Posteriormente, el electrón emerge de la barrera y oscila debido al campo eléctrico del láser. Resolviendo la integral, y usando la expresión

de τ_T obtenida en la ecuación (3.27), se obtiene el siguiente resultado para la trayectoria del electrón para un tiempo arbitrario

$$z(t) = \frac{E_0}{\omega^2}\left[\cos(\omega t) - \sqrt{\gamma^2+1}\right]. \tag{4.18}$$

La ecuación (4.18) es extendible fácilmente al caso en que $p_\rho \neq 0$ reemplazando γ por $\tilde{\gamma}$. De esta forma, obtenemos

$$z(t) = \frac{E_0}{\omega^2}\left[\cos(\omega t) - \sqrt{\gamma^2 + \frac{\omega^2 p_\rho^2}{E_0^2} + 1}\right]. \tag{4.19}$$

Considerando el caso $p_\rho = 0$ y si promediamos en el tiempo, hallamos el valor medio de la posición de oscilación del electrón

$$< z(t) >= -\frac{E_0}{\omega^2}\sqrt{1+\gamma^2} = -\alpha\sqrt{1+\gamma^2}, \tag{4.20}$$

que provee una corrección al Simple Man's Model dado por la ecuación (4.9) y coincide con la misma en el caso que $\gamma = 0$

4.3.1. Dinámica bajo la barrera.

Vamos a estudiar ahora la dinámica del electrón debajo de la barrera, recordando que allí el tiempo transcurre a lo largo del eje imaginario. Para analizar las expresiones de velocidad y trayectoria durante el tuneleo parametrizamos el tiempo imaginario como $t = i\tau$, donde τ adquiere valores desde τ_T al entrar a la barrera, hasta 0 a la salida de la misma.

En primer lugar, la expresión de la velocidad bajo la barrera se obtiene evaluando la ecuación (4.14) en tiempo imaginario, de forma tal que vale

$$\dot{z}(i\tau) = -i\frac{E_0}{\omega}\sinh(\omega\tau) = -i\sqrt{2I_p}\frac{\sinh(\omega\tau)}{\gamma}. \tag{4.21}$$

Este resultado expresa que la velocidad del electrón bajo la barrera es imaginaria pura. Si especificamos la velocidad en el tiempo de ionización $t_i = i\tau_T$ obtenemos que

$$\dot{z}(i\tau_T) = -i\sqrt{2I_p}. \tag{4.22}$$

Con esto, otra forma de expresar ambas condiciones iniciales del problema en el tiempo de ionización es $z(t_i) = 0$, y $\dot{z}(t_i) = -i\sqrt{2I_p} = -iv_c$, en donde v_c es el valor de velocidad clásica dada por la ecuación (1.5), en el instante de ionización.

Veamos ahora la trayectoria debajo de la barrera, evaluando la ecuación (4.18) en tiempos imaginarios $t = i\tau$. Con esto, se obtiene la siguiente trayectoria, que, para este caso particular, sigue siendo real incluso para tiempos imaginarios

$$z(i\tau) = \frac{E_0}{\omega^2}\left[\cosh(\omega\tau) - \sqrt{\gamma^2+1}\right]. \tag{4.23}$$

4.3.2. Distancia recorrida bajo la barrera

Si tomamos que el electrón emerge de la barrera para $t = 0$, la posición del electrón al final del tuneleo será

$$z(t=0) = \frac{E_0}{\omega^2}\left[1 - \sqrt{\gamma^2+1}\right], \tag{4.24}$$

la cual es negativa debido a la fase del campo eléctrico en dicho punto, evidenciando que aquí la barrera a tiempo $t = 0$ se forma para valores de z negativos. La distancia D recorrida por el electrón será el módulo de dicha expresión [45],

$$D = \frac{E_0}{\omega^2}\left[\sqrt{\gamma^2+1} - 1\right]. \tag{4.25}$$

Es interesante notar que dicha distancia es distinta a cero, excepto para el caso $\gamma = 0$, el cual coincide con el SMM. Por otro lado, tomando el régimen de tuneleo ($\gamma << 1$) la distancia que atraviesa el electrón debajo de la barrera es

$$D \simeq \frac{E_0\gamma^2}{2\omega^2} = \frac{I_p}{E_0}. \tag{4.26}$$

Con la definición de γ, en este límite el resultado coincide con el resultado para la barrera estática de la ecuación (1.3). Por otro lado, notemos que este resultado es independiente de la frecuencia del campo eléctrico. Esto expresa un concepto muy importante, que refiere a la adiabaticidad en la dinámica del sistema. El electrón recorre la misma distancia sin importar la frecuencia (siempre y cuando se cumpla $\gamma << 1$) debido a que en este régimen el electrón tunelea mucho más rápido de lo que tarda la barrera en oscilar. Esto hace que el proceso de ionización sea adiabático, es decir, que el electrón se adapte al movimiento de la barrera instante a instante.

En el límite multifotónico ($\gamma >> 1$) hallamos que la distancia que el electrón atraviesa debajo de la barrera es

$$D \simeq \frac{\sqrt{2I_p}}{\omega}, \tag{4.27}$$

la cual sí posee una alta dependencia con la frecuencia, al contrario que el caso anterior, incluso tendiendo a cero para frecuencias muy altas. Esto evidencia un comportamiento completamente no adiabático durante el proceso de ionización, en donde la barrera oscila mucho más rápido que el tiempo que tarda el electrón en atravesar la barrera de potencial. Esto hace que el electrón describa un movimiento efectivo afectado fuertemente por el movimiento de la barrera de potencial que atraviesa.

4.3.3. Tiempo de ionización

El tiempo de ionización para $u = 0$ es $t_i = i\frac{\sinh^{-1}\gamma}{\omega}$. En el régimen de tuneleo ($\gamma << 1$) vale

$$\tau_T \simeq \frac{\gamma}{\omega} = \frac{\sqrt{2I_p}}{E_0}, \tag{4.28}$$

que es igual al doble del tiempo clásico calculado en el capítulo 1 dado por la ecuación (1.6), i.e., $T_c = \frac{\tau_T}{2}$, aunque las distancias recorridas en dicho tiempo sí son iguales. La diferencia entre ambos tiempos se entiende en que la velocidad del electrón bajo la barrera no es constante como se asume en el capítulo 1, sino que, para $\gamma \simeq \omega\tau << 1$ varía según

$$\dot{z}(i\tau) = -i\frac{E_0}{\omega}\sinh(\omega\tau) \simeq -iE_0\tau. \tag{4.29}$$

Así se evidencia que el módulo de la velocidad del electrón es $v_c = \sqrt{2I_p}$ únicamente al comienzo de la ionización, decayendo linealmente luego. De esta forma, el valor medio de la velocidad será

$$< v_z(\tau) >= i\frac{E_0\tau_T}{2}, \tag{4.30}$$

y allí radica la razón de la diferencia entre ambos tiempos.

4.3.4. Energía cinética

Realizaremos ahora un análisis minucioso de la energía cinética en las tres etapas descriptas al comienzo de la sección.

Primero, previo a la ionización, el electrón posee energía total $-I_p$. Por el teorema del virial, considerando que el electrón está sometido a un potencial coulombiano $V \propto r^{-1}$, el valor medio

de la energía cinética será I_p. Durante la ionización, parametrizando $t = i\tau$, con $\tau \in (0, \tau_T)$, la expresión para la energía cinética utilizando la ecuación (4.21) es

$$T = -I_p \left(\frac{\sinh(\omega\tau)}{\gamma} \right)^2, \tag{4.31}$$

la cual es consistente con el movimiento del electrón bajo la barrera, dado que la diferencia entre la barrera de potencial y su energía total es negativa.

Otra cosa para remarcar es que en el tiempo de ionización la energía cinética vale $-I_p$, por lo cual hay una discontinuidad de la misma a $t = t_i$. Esto se debe a que estamos suponiendo que a partir del tiempo de ionización el campo eléctrico del láser domina la dinámica y despreciamos el potencial Coulombiano, es decir, la energía potencial atómica se hace cero instantáneamente. Esto hace que la energía cinética sea discontinua en $t = t_i$. A pesar de esto, como se apaga el potencial la energía cinética coincide con la total en este caso. Por ello, en ese punto, la energía total vale $-I_p$ y esto hace que la misma sea continua en ese instante.

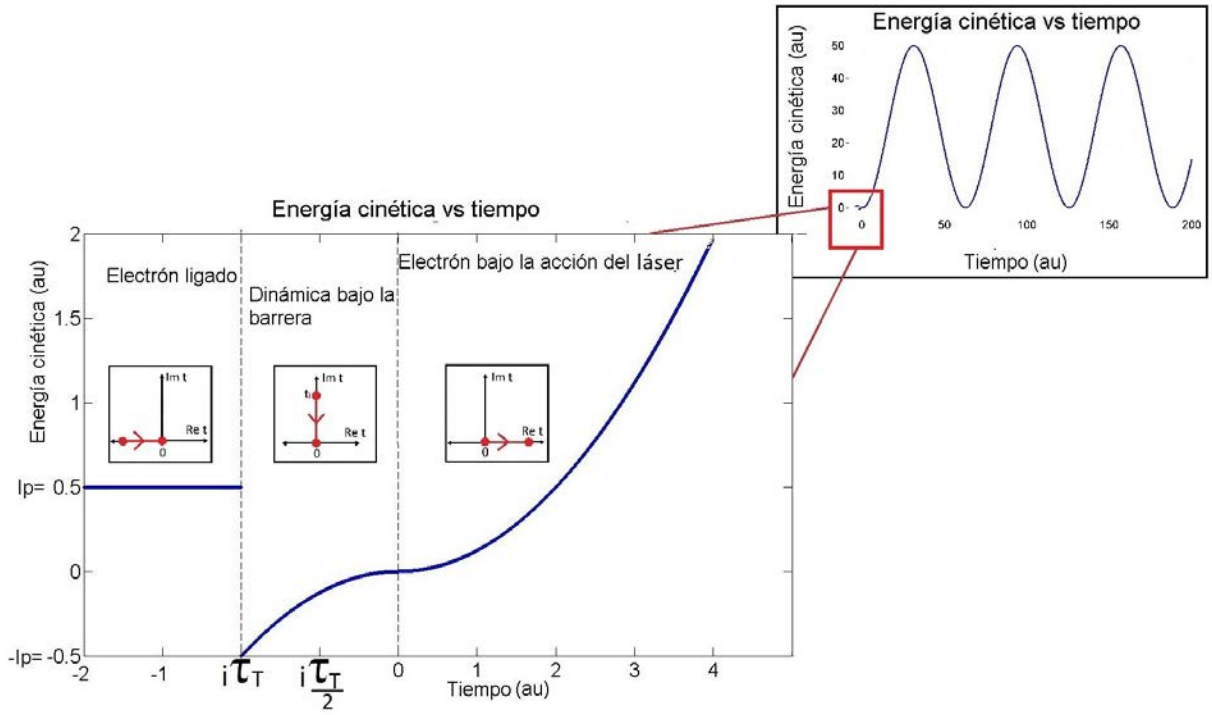

Figura 4.3: Energía cinética en función del tiempo, para $\omega = 0{,}05$ y $\gamma = 0{,}1$.

Finalmente, luego de que emerge el electrón de la barrera, para tiempos reales, la energía cinética vale

$$T = \frac{E_0^2}{2\omega^2} \sin^2(\omega t) = 2U_p \sin^2(\omega t). \tag{4.32}$$

Para $t = 0$, la misma es continua y vale $T = 0$ ya que la velocidad es nula para dicho instante. Además podemos apreciar que el valor medio de T para tiempos $t > 0$ es U_p, lo cual es consistente con la definición de energía ponderomotriz.

En la figura 4.3 se puede apreciar cómo varía la energía cinética, para $I_p = 0{,}5$ (átomo de hidrógeno), frecuencia $\omega = 0{,}05$, y un valor de $\gamma = 0{,}1$. La región central delimitada por líneas punteadas se corresponde al electrón transitando tiempos imaginarios debajo de la barrera. El electrón ligado tiene energía cinética constante igual a I_p. Al ionizar, se aprecia la discontinuidad de la energía cinética, aunque su módulo es continuo, hasta que emerge en tiempo $t = 0$ con pendiente cero (aceleración nula) y comienza a oscilar bajo la acción del campo eléctrico.

4.3.5. Tasa de ionización

Analizamos ahora el comportamiento exponencial de la tasa de ionización del sistema. Esto lo hacemos considerando de la ecuación (3.18) sólo un tiempo de ionización, quedándonos únicamente con el primer término de la sumatoria. Consideramos el primer tiempo de ionización, el cual, para el caso $u = 0$, es puramente imaginario y vale $t_i = i\tau_T = i\frac{\sinh^{-1}\gamma}{\omega}$. En el siguiente capítulo analizamos más exhaustivamente los efectos de interferencia que provienen de considerar los demás tiempos.

Tomando $p_z = p_\rho = 0$ por simplicidad, calculamos la acción dada por la ecuación (3.11) del electrón para el tiempo $t_i \equiv t_1^{(1)} = i\tau_T$. La misma es puramente imaginaria y vale

$$S(t_i) = -i\frac{E_0^2}{\omega^3}\left[\left(\gamma^2 + \frac{1}{2}\right)\frac{\omega\tau_T}{2} - \frac{1}{8}\sinh(2\omega\tau_T)\right]. \tag{4.33}$$

Para calcular la probabilidad de transición tomamos módulo cuadrado a la amplitud dada por la ecuación (3.18), obteniendo

$$|T|^2 \propto \exp(2\mathrm{Im}[S(t_i)]). \tag{4.34}$$

Utilizando la expresión de la acción de la ecuación (4.33), la probabilidad de ionización para un valor de γ arbitrario es

$$|T|^2 \propto \exp\left\{-\frac{E_0^2}{\omega^3}\left[\left(\gamma^2 + \frac{1}{2}\right)\sinh^{-1}\gamma - \frac{\gamma}{2}\sqrt{\gamma^2+1}\right]\right\}, \tag{4.35}$$

el cual coincide con los resultados bibliográficos [23].

Para el límite de tuneleo tomamos $\gamma << 1$, considerando el primer orden no trivial del argumento de la exponencial. De esta forma obtenemos

$$|T|^2 \propto \exp\left[-\frac{2}{3}\frac{(2I_p)^{3/2}}{E_0}\right], \tag{4.36}$$

la cual reproduce el resultado para un campo eléctrico estático calculado en la sección 2.2. Éste coincide con el calculado por Landau [41] y los resultados de las teorías PPT [23] y ADK [24]. Lo más importante que muestra la ecuación (4.36) es la independencia del mismo con la frecuencia del láser, consistente con un régimen adiabático del electrón en el campo eléctrico oscilante, en el cual la barrera de potencial oscila mucho más lento que el tiempo que tarda el electrón en atravesarla.

Por otro lado, en el límite multifotónico ($\gamma >> 1$) obtenemos

$$|T|^2 \propto E^{2\frac{I_p}{\omega}} \propto I^{\frac{I_p}{\omega}} = I^n. \tag{4.37}$$

En primer lugar, este resultado muestra una fuerte dependencia de la tasa de ionización con la frecuencia, expresando un régimen altamente no adiabático. Adicionalmente, el resultado es proporcional a la intensidad del láser elevado a $I_p/\omega = n$, en donde n es el número de fotones absorbidos por el electrón para adquirir una energía I_p e ionizar. De esta forma se evidencia el comportamiento multifotónico y perturbativo en este régimen, ya que admite un desarrollo en potencias de γ^{-1} de la forma

$$|T|^2 \propto \gamma^{-2n}. \tag{4.38}$$

Este régimen está bien caracterizado con teorías perturbativas, aplicado a láseres de baja intensidad.

En la figura 4.4 (a) graficamos la tasa de ionización dada por la ecuación (4.35) en función del campo eléctrico. En la misma podemos apreciar cómo la misma tiende a 1 para campos altos (régimen de tuneleo), el cual es un comportamiento esperado y reproduce el resultado dado por la ecuación (4.36), mientras que para campos pequeños (régimen multifotónico) el comportamiento es el dado por la ecuación (4.37) y la probabilidad tiende a cero.

Por otro lado, en la figura 4.4 (b) se grafica la tasa de transición en función de la frecuencia. Para frecuencias altas, el sistema se halla en el régimen multifotónico y la probabilidad de transición tiende a 1 según la ecuación (4.37), ya que la energía de los fotones en este caso

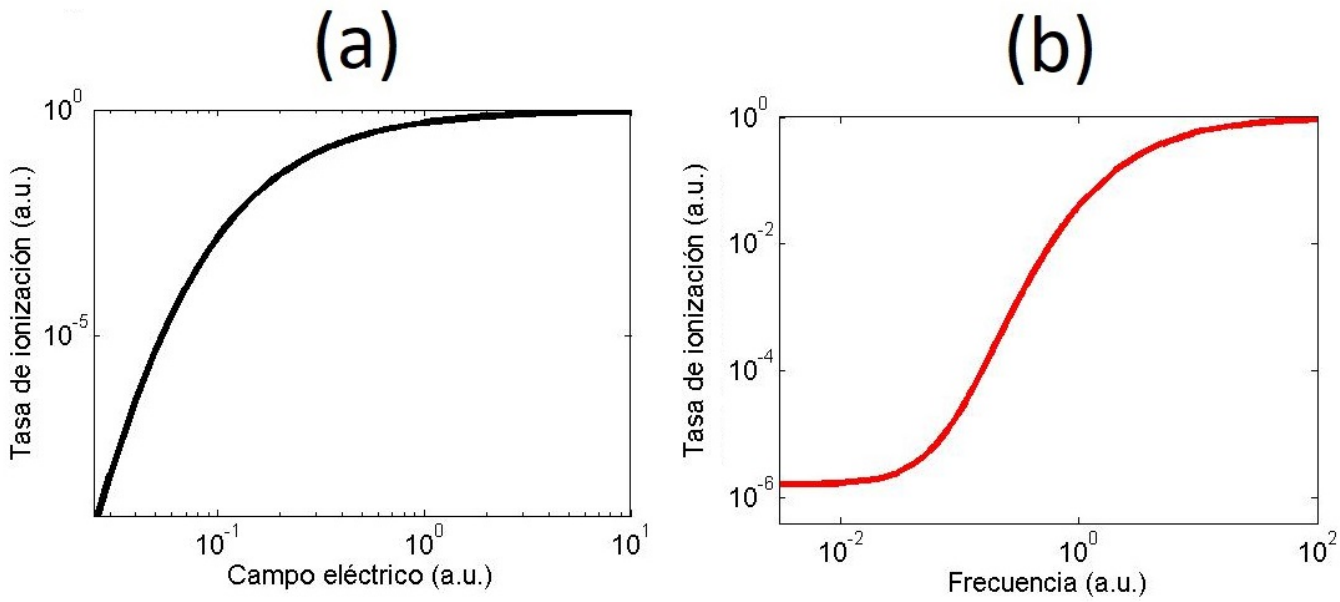

Figura 4.4: Tasa de ionización en función del campo eléctrico (a) y frecuencia (b). En el primer caso, se utilizó $\omega = 0{,}05$, y en el segundo caso, un valor de $E_0 = 0{,}05$.

tiende a ser mucho mayor al potencial de ionización. Por otro lado, para frecuencias bajas el régimen es el de tuneleo, dado por la ecuación (4.36), en donde el comportamiento del sistema es independiente de la frecuencia. Por ende, la probabilidad es constante, y el mismo se halla en un régimen adiabático.

4.4. Ionización fuera de los máximos de campo eléctrico ($u \neq 0$)

Analizamos ahora el caso $u \neq 0$ considerando $|u| << 1$, es decir, la ionización en momentos cercanos a los máximos de campo eléctrico, que es donde la ionización es máxima. En este caso, el electrón va a emerger de la barrera de potencial a un tiempo $t_0 \neq 0$. Recordemos que la solución de la ecuación (3.20) del tiempo de ionización para $|u| << 1$ es

$$t_i = t_0 + i\tau_T = \frac{u}{\omega\sqrt{\gamma^2+1}} + i\frac{\sinh^{-1}(\gamma)}{\omega}. \tag{4.39}$$

Notemos que, a este orden de aproximación, hay una corrección a la parte real del tiempo de ionización respecto al caso $u = 0$, la cual ahora es no nula. La corrección a la parte imaginaria

es de orden $O(u^2)$, y la despreciamos.

La condición inicial que usamos en este caso es que el electrón emerge a tiempo $t = t_0$, igual a la parte real del tiempo de ionización. Mientras transcurre debajo de la barrera, el electrón transita tiempo imaginario desde $i\tau_T$ hasta 0, manteniendo su parte real constante t_0 hasta que finalmente emerge en t_0 con velocidad $\dot{z}(t = t_0)$. A su vez, con la ecuación (3.26) del momento generalizado podemos escribir a primer orden

$$\dot{z}(t_0) = p_z \left(1 - \frac{1}{\sqrt{\gamma^2 + 1}}\right). \tag{4.40}$$

La misma se puede expresar en los dos límites de tuneleo y multifotónico como

$$\dot{z}(t_0) = \frac{p_z}{2}\gamma^2 \tag{4.41}$$

y

$$\dot{z}(t_0) = p_z, \tag{4.42}$$

respectivamente.

La ecuación (4.12) que da la velocidad del electrón se puede escribir como

$$\dot{z}(t) = -\frac{E_0}{\omega}\sin(\omega t) + p_z, \tag{4.43}$$

en donde p_z es la velocidad con la cual los electrones llegan al detector ubicado en el infinito, cuando el pulso de campo eléctrico ya está apagado, es decir, es la velocidad de deriva.

La ecuación de la trayectoria para $t \geq t_0$ debe ser real. Para ello, imponemos que el electrón al emerger de la barrera haya recorrido una distancia real D igual a la distancia recorrida bajo la barrera en el caso $u = 0$, dada por la ecuación (4.25). Esto se debe a que el campo eléctrico vale

$$E(t_0) = E_0 \cos(\omega t_0) \simeq E_0, \tag{4.44}$$

es decir, a primer orden la barrera no se habrá modificado respecto a la situación anterior. Esto hará que su trayectoria para $t \geq t_0$ sea real, lo cual es lo que buscamos.

La condición inicial a pedir al integrar la ecuación (4.43) es entonces

$$z(t = t_0) = \frac{E_0}{\omega^2}\left(1 - \sqrt{\gamma^2 + 1}\right) = -D, \tag{4.45}$$

donde, según la ecuación (4.25), D es la distancia recorrida por el electrón bajo la barrera en el caso $u = 0$, y tiene una dependencia con γ. Con esta condición, al realizar la integral de $z(t)$ en la ecuación (4.43), obtenemos la trayectoria

$$z(t) = -D + \frac{E_0}{\omega^2}\left[\cos(\omega t) - \cos(\omega t_0)\right] + p_z(t - t_0), \tag{4.46}$$

que es válida para un valor de p_z arbitrario, y real para tiempos mayores a t_0. Reemplazando la expresión (4.46) con $t_0 = \frac{u}{\omega\sqrt{\gamma^2+1}}$, a orden u obtenemos

$$z(t) = -D + \frac{E_0}{\omega^2}\left[\cos(\omega t) - 1\right] + p_z t, \tag{4.47}$$

en donde se puede ver que para $t = t_0$ a $O(u)$ se recupera la condición inicial pedida. Podemos apreciar que, para tiempos reales mayores a t_0, la trayectoria es efectivamente real, lo cual era lo buscado.

4.4.1. Dinámica bajo la barrera

Analicemos ahora la dinámica del electrón debajo de la barrera. Para hacer esto, evaluamos la expresión dada por la ecuación (4.47) en un tiempo complejo $t = t_0 + i\tau$, en donde $0 \leq \tau \leq \tau_T$.

La ecuación (4.47) se puede escribir como

$$\mathrm{Re}[z(t_0 + i\tau)] \simeq -D + \frac{E_0}{\omega^2}\left[\cosh(\omega\tau) - 1\right], \tag{4.48}$$

$$\mathrm{Im}[z(t_0 + i\tau)] \simeq \frac{p_z}{\omega}\left[\omega\tau - \frac{\sinh(\omega\tau)}{\sqrt{\gamma^2+1}}\right]. \tag{4.49}$$

Notemos que durante el tuneleo, el electrón transita posiciones complejas durante tiempos complejos.

En primer lugar, la parte real de la trayectoria dada por la ecuación (4.48) no posee información de la velocidad de deriva, debido a que ese término es de orden cuadrático en u. Por lo tanto, dicha velocidad no juega un papel significativo durante el tuneleo del electrón. Por otro lado, si evaluamos la parte real de la trayectoria en el tiempo real en el que el electrón emerge de la barrera, obtenemos lo pedido en la condición inicial

$$\mathrm{Re}[z(t_0)] = -D. \tag{4.50}$$

Además, si calculamos la posición en el tiempo de ionización dado por la ecuación (4.39) obtenemos

$$\mathrm{Re}[z(t_i)] = -D + D = 0. \tag{4.51}$$

Por lo tanto, la parte real de la trayectoria se anula al comenzar la ionización, lo cual es consistente con el hecho de que el electrón se halle en posición real 0 al ionizar.

Por otro lado, podemos ver que cuando el electrón emerge de la barrera en $t = t_0$ ($\tau = 0$) la parte imaginaria de la posición se anula, i.e.,

$$\mathrm{Im}[z(t_0)] = 0, \tag{4.52}$$

que es lo que buscábamos al imponer la condición inicial pedida. Pero durante el tuneleo, la parte imaginaria de la posición toma valores no nulos, evolucionando en el tiempo complejo. En particular, para el tiempo de ionización la misma vale

$$\mathrm{Im}[z(t_i)] = \frac{p_z}{\omega}\left[\sinh^{-1}(\gamma) - \frac{\gamma}{\sqrt{\gamma^2+1}}\right]. \tag{4.53}$$

Se puede observar en la figura 4.5 que variando E_0 y manteniendo $I_p = 0{,}5$ y $\omega = 0{,}05$ constantes, con $u = 0{,}001$, para ambos límites (tuneleo y multifotónico) la parte imaginaria de la trayectoria tiende a anularse, y que incluso existe un valor de γ para el cual ésta adquiere un valor máximo. Calculado numéricamente, este valor es $\gamma_{max} = 2{,}92$. Es importante notar que este valor no depende de ningún parámetro del problema sino que es un resultado general.

En la figura 4.5 se aprecia además cómo varía la parte imaginaria de la trayectoria en función del tiempo imaginario τ, dejando fija la parte real, es decir, mientras el electrón está transitando debajo de la barrera. Podemos apreciar cómo ésta decrece, hasta que, finalmente al emerger, se anula.

En la figura 4.6 (a) se grafica la parte real de la trayectoria mientras el electrón se encuentra debajo de la barrera, a la izquierda de la línea punteada, dada por la ecuación (4.48). Se puede notar que al orden considerado, la misma no depende del valor de u. Además, al emerger, es decir, a $t = t_0$, el electrón recorrió una distancia D. A partir de dicho tiempo (que depende del valor de u según la ecuación (4.39)) el electrón continúa su dinámica según la ecuación (4.47), lo cual se grafica en la figura 4.6 (b). Para el caso $u = 0$ oscila en torno a un punto medio dado

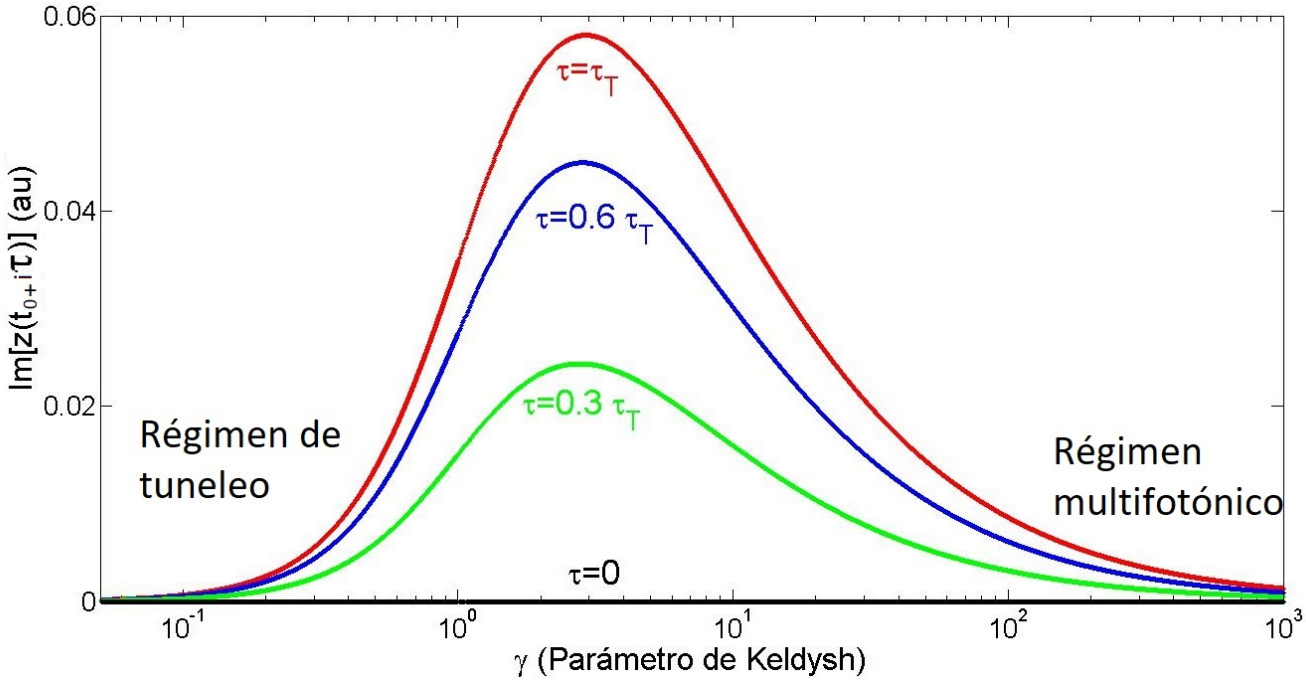

Figura 4.5: Evolución temporal de la parte imaginaria de la trayectoria, con valores $\omega = 0{,}05$ *y* $u = 0{,}001$.

por la ecuación (4.20). Además, en la figura podemos notar que para ciertos valores de u las trayectorias vuelven al origen en algún tiempo, llevados nuevamente por el campo eléctrico. Esto lleva a la posibilidad de recombinación del átomo en $z = 0$, emitiendo radiación de frecuencias pertenecientes a armónicos altos del láser pulsado al que se lo somete, en un proceso denominado *generación de armónicos altos* (HHG). Este fenómeno, observado experimentalmente a fines de la década del 80 [46], ocurre debido a que, luego de ionizar, el potencial debido al campo eléctrico se invierte, ocasionando que, bajo ciertas condiciones, el electrón retorne al núcleo. El modelo más simple para estudiarlo es el denominado modelo de los tres pasos [47, 48]. Este fenómeno no es, sin embargo, objeto de estudio del presente trabajo.

Analicemos ahora la velocidad bajo la barrera. Tomando la expresión dada por la ecuación (4.43) y evaluándola en tiempo $t = t_0 + i\tau$, obtenemos

$$\dot{z}(t_0 + i\tau) = -p_z \left(\frac{\cosh(\omega\tau)}{\sqrt{\gamma^2 + 1}} - 1 \right) - i\frac{E_0}{\omega} \sinh(\omega\tau). \tag{4.54}$$

Para $\tau = 0$ reobtenemos la primera condición inicial que pedimos dada por la ecuación (4.40),

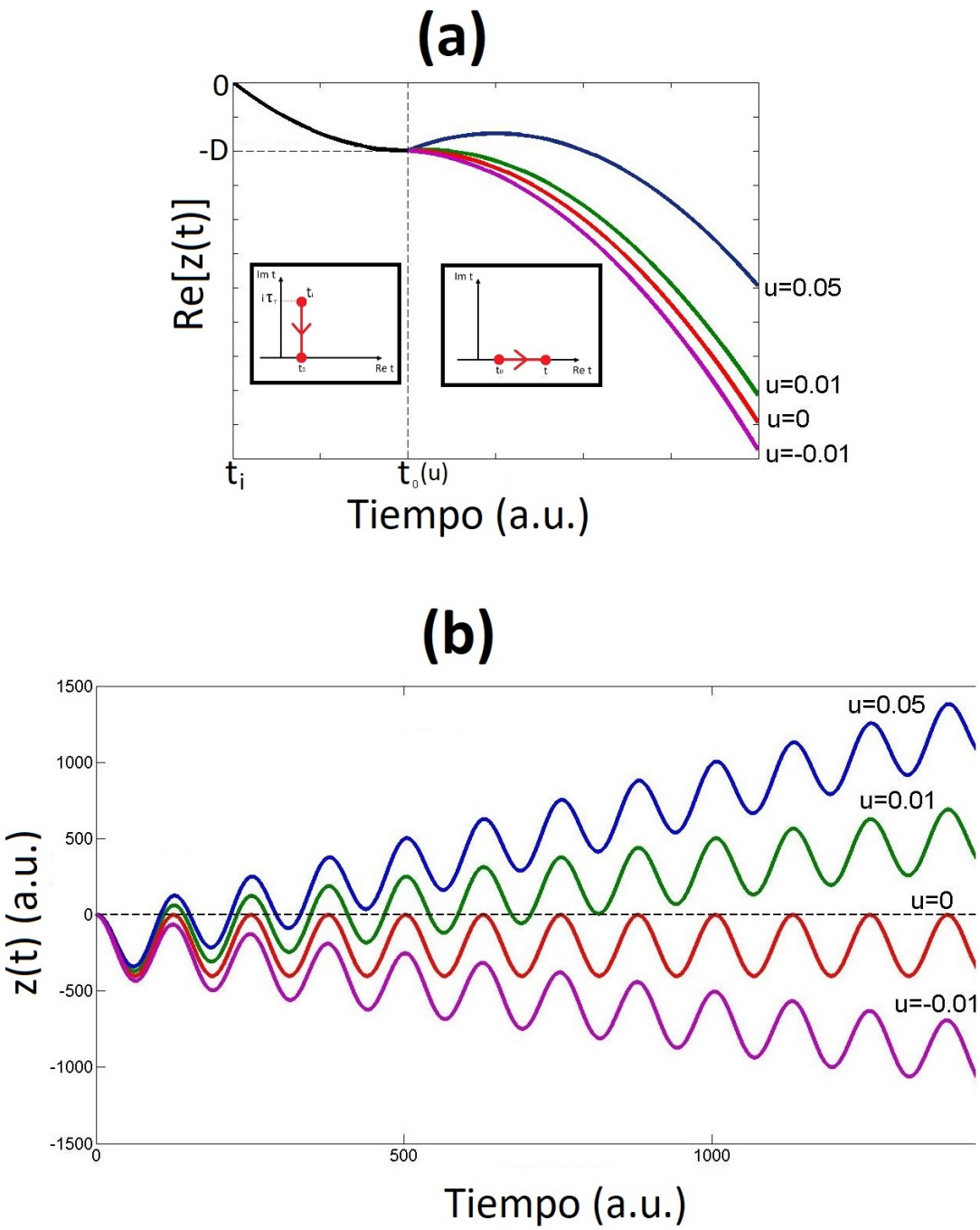

Figura 4.6: Parte real de la trayectoria para distintos valores de u, mientras transita la región bajo la barrera (a) y luego de emerger de la misma (b), con valores de $I_p = 0{,}5$, $\omega = 0{,}05$ y $E_0 = 0{,}05$.

la cual es puramente real. Para el tiempo de ionización, la velocidad es imaginaria pura y vale

$$\dot{z}(t_i) = -i\frac{E_0\gamma}{\omega} = -i\sqrt{2I_p}, \tag{4.55}$$

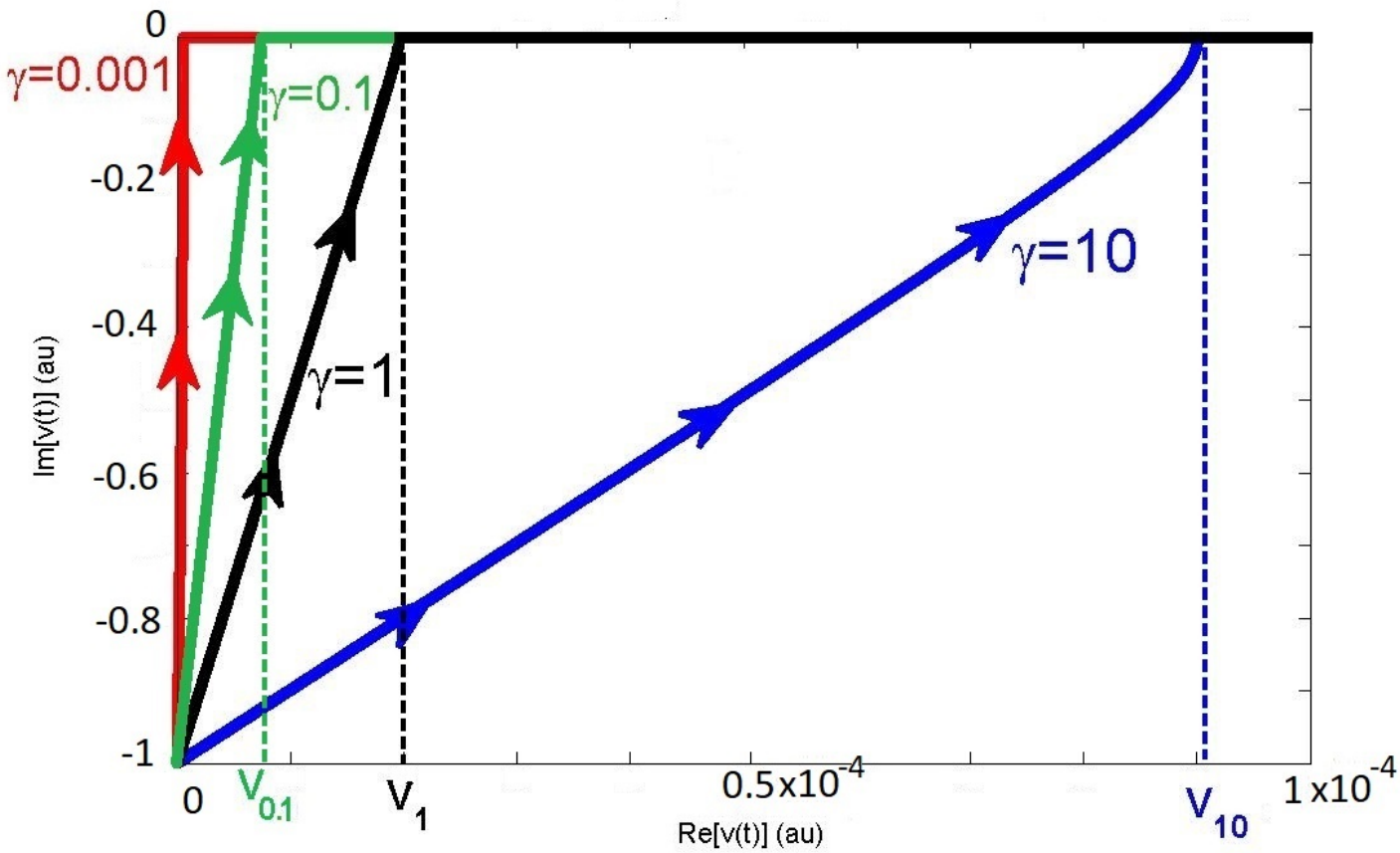

Figura 4.7: Evolución temporal de la velocidad compleja para distintos valores de γ.

que es compatible con la energía de un átomo igual a $-I_p$.

En resumen, el electrón entra a la barrera con velocidad imaginaria y mientras penetra la barrera su velocidad es compleja (teniendo parte imaginaria y parte real). Pero al emerger, la parte imaginaria de la velocidad se anula, y el electrón sigue su movimiento con velocidad real.

En la figura 4.7 se grafica la velocidad compleja para cuatro valores distintos de γ, con $\omega = 0{,}05$ y $u = 0{,}001$. Notemos que la velocidad con la que el electrón emerge de la barrera, notada en el gráfico como v_γ, crece con γ, y es de orden 10^{-4}. En particular, para $\gamma \to 0$, la velocidad bajo la barrera es imaginaria pura, de modo que emerge con velocidad nula. Esto concuerda con el Simple Man's Model ($\gamma = 0$), en el cual la velocidad del electrón es inicialmente cero.

4.4.2. Energía cinética

Analicemos ahora más exhaustivamente la energía del electrón. Con la expresión de la velocidad para $t > t_0$ dada por la ecuación (4.43), para un u arbitrario obtenemos la energía cinética

$$T = \frac{\dot{z}^2(t)}{2} = \frac{E_0^2}{2\omega^2}\sin^2(\omega t) - 2p_z\frac{E_0}{\omega}\sin(\omega t) + \frac{p_z^2}{2}. \tag{4.56}$$

Si tomamos el promedio temporal en un ciclo, con la definición de u obtenemos

$$< T >= U_p + \frac{p_z^2}{2}. \tag{4.57}$$

Esta expresión es consistente con el Simple Man's Model, y expresa la energía ponderomotriz, que es la energía media que adquiere el electrón en un ciclo, con el término adicional de deriva provisto por el momento paralelo del electrón.

Veamos la energía debajo de la barrera con la expresión de la velocidad para tiempos complejos calculada anteriormente. A orden u, obtenemos

$$T = \frac{\dot{z}^2}{2}(\tau) = -2U_p\sinh^2(\omega\tau) + i4p_z\frac{\omega}{E_0}U_p\sinh(\omega\tau)\left[\frac{\cosh(\omega\tau)}{\sqrt{\gamma^2+1}} - 1\right]. \tag{4.58}$$

Podemos corroborar que para el tiempo de ionización la energía cinética también es real y vale

$$T(t_i) = -I_p, \tag{4.59}$$

lo cual es, como es de esperar, igual a la energía del electrón ligado, evidenciando la continuidad de la energía total en ese instante.

Capítulo 5

Dinámica semiclásica: interferencias cuánticas de trayectorias

En este capítulo analizamos la interferencia entre todas las posibles trayectorias dadas por la dinámica cuasiclásica calculadas en el capítulo anterior, al estilo de las integrales de camino de Feynman [49], a partir de las expresiones que se derivan para las tasas de ionización del sistema. Debido a dicha interferencia, la dinámica aquí es denominada *semiclásica*.

Retomando la expresión para la amplitud de transición de la ecuación (3.18), obtenida utilizando la aproximación de campo fuerte y la aproximación de punto silla, podemos notar que la misma es proporcional a una sumatoria de exponenciales complejas de la acción clásica del electrón evaluada en los tiempos de ionización. Por ello, previo al cálculo de la amplitud de transición veamos la expresión de esta acción. Para un campo eléctrico $\vec{E} = E_0 \cos(\omega t)\hat{z}$, ésta se puede expresar como

$$S(t,t') = \tilde{I}_p(t-t') + \frac{E_0^2}{2\omega^2}\int_{t'}^{t} \left[u - \sin(\omega t'')\right]^2 dt'' = \frac{E_0^2}{2\omega^2}\left[\tilde{\gamma}^2(t-t') + \int_{t'}^{t} \left[u - \sin(\omega t'')\right]^2 dt''\right], \tag{5.1}$$

en donde $\tilde{\gamma} = \frac{\omega}{E_0}\sqrt{2\tilde{I}_p}$ y $u = \frac{p_z\omega}{E_0}$. Al calcular la integral de la ecuación (5.1), la acción se puede escribir como

$$S(t,t') = S(t) - S(t'), \tag{5.2}$$

en donde definimos

$$S(t) = \frac{E_0^2}{2\omega^2}\left[\tilde{\gamma}^2 t + \frac{1}{4\omega}\left[2(2u^2+1)\omega t + 8u\cos(\omega t) - \sin(2\omega t)\right]\right]. \tag{5.3}$$

Si consideramos $t' \to -\infty$, la acción evaluada en dicho tiempo es puramente real, y como ya se analizó en el capítulo 2, a pesar de diverger, dicho término no contribuirá a la probabilidad de ionización, por lo cual lo podemos obviar.

A orden lineal en u, la parte imaginaria de la acción para todos los tiempos de ionización es la misma, y vale

$$\mathrm{Im}[S(t_i)] = \frac{E_0^2}{\omega^3}\left[\frac{\omega^3}{E_0^2}\tilde{I}_p\tau_T + \frac{1}{4}\omega\tau_T - \frac{1}{8}\sinh(2\omega\tau_T)\right], \tag{5.4}$$

en donde $\tau_T = \frac{\sinh^{-1}\gamma}{\omega}$ es la parte imaginaria del tiempo de ionización a este orden, dada por la ecuación (3.29).

Bajo las aproximaciones de campo fuerte y punto silla, la expresión de la amplitud de transición resulta

$$T = \frac{-i(2I_p)^{5/4}}{2\sqrt{\tilde{I}_p}|E(t_i)|}\sum_{m=1}^{N}\sum_{\alpha=1,2} e^{-iS(t_m^{(\alpha)})}, \tag{5.5}$$

en donde $t_m^{(\alpha)}$ representa los tiempos de ionización soluciones de la ecuación (3.15). Allí, el subíndice $m = 1, ..., N$ representa el número del ciclo del láser, mientras que el superíndice $\alpha = 1, 2$ denota el primer y segundo tiempo de ionización en cada ciclo, respectivamente, como se ilustra en la figura 4.1, de modo tal que el número total de tiempos de ionización es $2N$. Allí, $t_i = t_0 + i\tau_T$ es el primer tiempo de ionización, tal que $t_i \equiv t_1^{(1)}$. Notemos además que, por la periodicidad del coseno, el módulo del campo eléctrico es el mismo para todos los tiempos de ionización, por lo que en la ecuación (5.5) salió factorizado de la sumatoria.

Para simplificar la notación llamamos $S(t_m^{(\alpha)}) \equiv S_m^\alpha$. Con esto, definimos dos cantidades

$$\bar{S}_m = \frac{\mathrm{Re}(S_m^1) + \mathrm{Re}(S_m^2)}{2}, \tag{5.6}$$

y

$$\Delta S_m = \mathrm{Re}(S_m^1) - \mathrm{Re}(S_m^2). \tag{5.7}$$

Con estas definiciones, el factor de la suma en la ecuación (5.5) se puede escribir como

$$\sum_{m=1}^{N}\sum_{\alpha=1,2} e^{-iS_m^\alpha} = e^{-\mathrm{Im}[S(t_i)]}\sum_{m=1}^{N} e^{-i\bar{S}_m}\left(e^{-i\frac{\Delta S_m}{2}} + e^{i\frac{\Delta S_m}{2}}\right) = e^{-\mathrm{Im}[S(t_i)]}\sum_{m=1}^{N} 2\cos\left(\frac{\Delta S_m}{2}\right)e^{-i\bar{S}_m} \tag{5.8}$$

El primer factor sale de la sumatoria debido a que la parte imaginaria de la acción es la misma para todos los tiempos de ionización. Se puede verificar que la *acción acumulada* ΔS_m entre t_m^1 y t_m^2 tampoco depende de m, por lo que también se puede factorizar en la sumatoria, obteniendo

$$\sum_{m=1}^{N}\sum_{\alpha=1,2} e^{-iS_m^\alpha} = e^{-\mathrm{Im}[S(t_i)]} 2\cos\left(\frac{\Delta S}{2}\right)\sum_{m=1}^{N} e^{-i\bar{S}_m}. \tag{5.9}$$

Además, es posible reescribir la *acción media* $\bar{S}_m$ de la forma

$$\bar{S}_m = S_0 - m\tilde{S}, \tag{5.10}$$

donde

$$S_0 = -\frac{\pi}{2\omega}\left[\tilde{I}_p + U_p + \frac{p_z^2}{2}\right], \tag{5.11}$$

$$\tilde{S} = \frac{2\pi}{\omega}\left[\tilde{I}_p + U_p + \frac{p_z^2}{2}\right]. \tag{5.12}$$

En base a estas cantidades, y simplificando las fases globales, con la ecuación (5.5) podemos escribir la probabilidad de transición como

$$|T|^2 = e^{-2\mathrm{Im}[S(t_i)]}|C(t_i)|^2 4\cos^2\left(\frac{\Delta S}{2}\right)\left|\sum_{m=1}^{N}\left(e^{i\tilde{S}}\right)^m\right|^2, \tag{5.13}$$

El último factor de la ecuación (5.13) es una suma geométrica y se expresa como

$$\sum_{m=1}^{N}\left(e^{i\tilde{S}}\right)^m = e^{i\frac{\tilde{S}}{2}(N+1)}\frac{\sin(\frac{N\tilde{S}}{2})}{\sin(\frac{\tilde{S}}{2})}, \tag{5.14}$$

por lo que la expresión final de la probabilidad de transición queda

$$|T|^2 = \underbrace{e^{-2\mathrm{Im}[S(t_i)]}}_{\Gamma(\vec{p})}|C(t_i)|^2 4\underbrace{\cos^2\left(\frac{\Delta S}{2}\right)}_{F(\vec{p})}\underbrace{\left(\frac{\sin(\frac{N\tilde{S}}{2})}{\sin(\frac{\tilde{S}}{2})}\right)^2}_{B(\vec{p})} \equiv \Gamma(\vec{p})|C(t_i)|^2 4F(\vec{p})B(\vec{p}). \tag{5.15}$$

El factor $\Gamma(\vec{p}) = e^{-2\mathrm{Im}[S(t_i)]}$ provee el comportamiento exponencial de la tasa de ionización y es el expresado en la ecuación (4.35), el cual ya fue analizado en la sección 4.3.5. Por otro lado, los factores $F(\vec{p})$ y $B(\vec{p})$ son factores de interferencia entre todas las posibles trayectorias electrónicas. La función $F(\vec{p})$ representa la interferencia entre trayectorias dadas por los dos tiempos de ionización de cada ciclo, y es denominada *interferencia intraciclo*. A su vez, la interferencia entre trayectorias dadas en tiempos de ionización de distintos ciclos está representada por la

función $B(\vec{p})$ y es llamada *interferencia interciclo* [50]. Ahora analicemos por separado cada uno de los factores.

El primer factor se expresa

$$|C(t_i)|^2 = \frac{(2I_p)^{\frac{5}{2}}}{4\tilde{I}_p} \frac{1}{E_0^2(\gamma^2+1)}, \tag{5.16}$$

y será un factor de modulación que no afectará al comportamiento general del sistema. El factor de intraciclo $F(\vec{p})$ no depende del número de ciclos N del láser, representando la interferencia entre cada par de trayectorias de un mismo ciclo óptico. Y respecto al factor interciclo, el mismo es análogo al del patrón de interferencia de N rendijas. En el mismo se puede apreciar que $B(\vec{p})$ depende de N, pero si tomamos el límite $N \to \infty$ se observa una serie de picos (deltas de dirac) espaciados con la periodicidad $\frac{\tilde{S}}{2} = n\pi$, de modo tal que

$$\lim_{N\to\infty} B(\vec{p}) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \delta(\tilde{S} - 2n\pi). \tag{5.17}$$

Lo interesante que surge es que se puede apreciar aquí la conservación de la energía. Los máximos del factor $B(\vec{p})$ se dan cuando $\tilde{S} = 2\pi n$, es decir,

$$\frac{2\pi}{\omega}\left(\tilde{I}_p + U_p + \frac{p_z^2}{2}\right) = 2n\pi. \tag{5.18}$$

De esta expresión se pueden identificar, en el primer miembro, a la energía ponderomotriz U_p, que es la energía adquirida en un ciclo; $\frac{p_z^2}{2} = \varepsilon_z$ es la energía cinética correspondiente al movimiento a lo largo del eje de polarización, e $\tilde{I}_p$ es el potencial de ionización (con un término adicional $\frac{p_\rho^2}{2}$ correspondiente al movimiento transversal al eje de polarización). Por ende, si juntamos los momentos paralelo y perpendicular en la energía cinética total ε_n, obtenemos

$$\varepsilon_n = n\omega - U_p - I_p, \tag{5.19}$$

lo cual da la conservación de energía para la absorción de n fotones.

En la figura 5.1 vemos cómo varía la función $B(p)$ (normalizada a 1) en función de la energía cinética del electrón variando el número de ciclos N. Se aprecia cómo la función, al aumentar N, se asemeja a una suma de deltas de Dirac equiespaciadas según la ecuación (5.17), evidenciando la absorción múltiple de fotones del sistema. El espaciamiento entre dos picos consecutivos es igual a la energía ω del fotón.

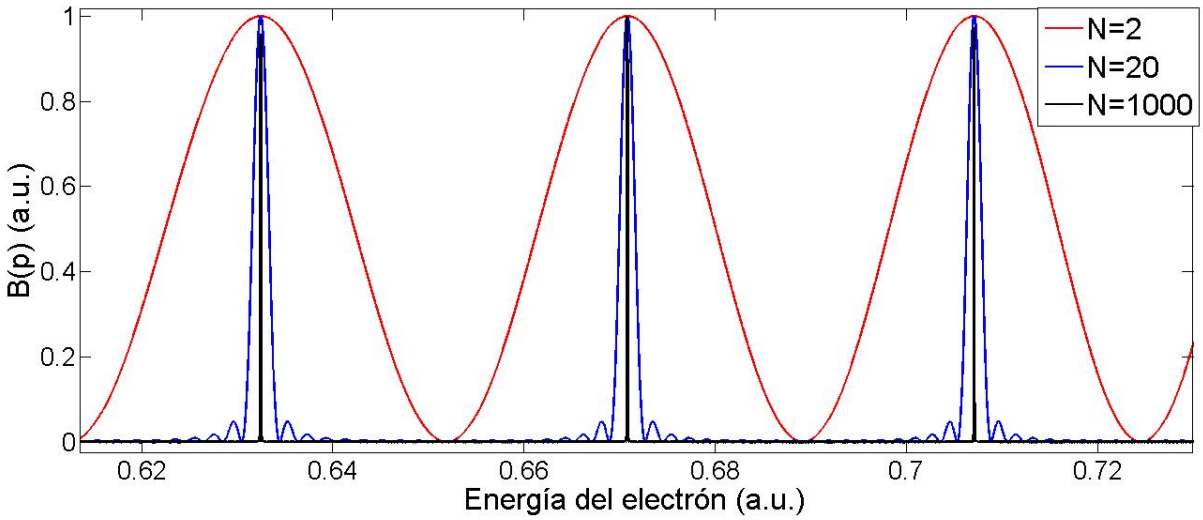

Figura 5.1: Interferencia interciclo para distintos valores del número de ciclos ópticos, con $I_p = 0{,}5$, $\omega = 0{,}05$ *y* $\gamma = 0{,}1$.

Graficamos a continuación en la figura 5.2 (a) ambas funciones intra e interciclo en función de las componentes paralela y perpendicular del momento respecto al eje de polarización del láser. El producto de ambas se muestra en la figura 5.2 (b), evidenciando el comportamiento general del sistema dentro de la SFA y de la SPA dado por la ecuación (5.15). En la figura 5.2 (c) se muestra el gráfico de la solución numérica de la SFA calculando la integral temporal de la ecuación (3.13) numéricamente. Al comparar con la SPA, se corrobora que efectivamente los tiempos de ionización son los que dominan la dinámica. Finalmente, el comportamiento coincide cualitativamente con la solución numérica de la ecuación de Schrödiger dependiente del tiempo exacta (considerando el potencial coulombiano más allá de la SFA), graficado en la figura 5.2 (d).

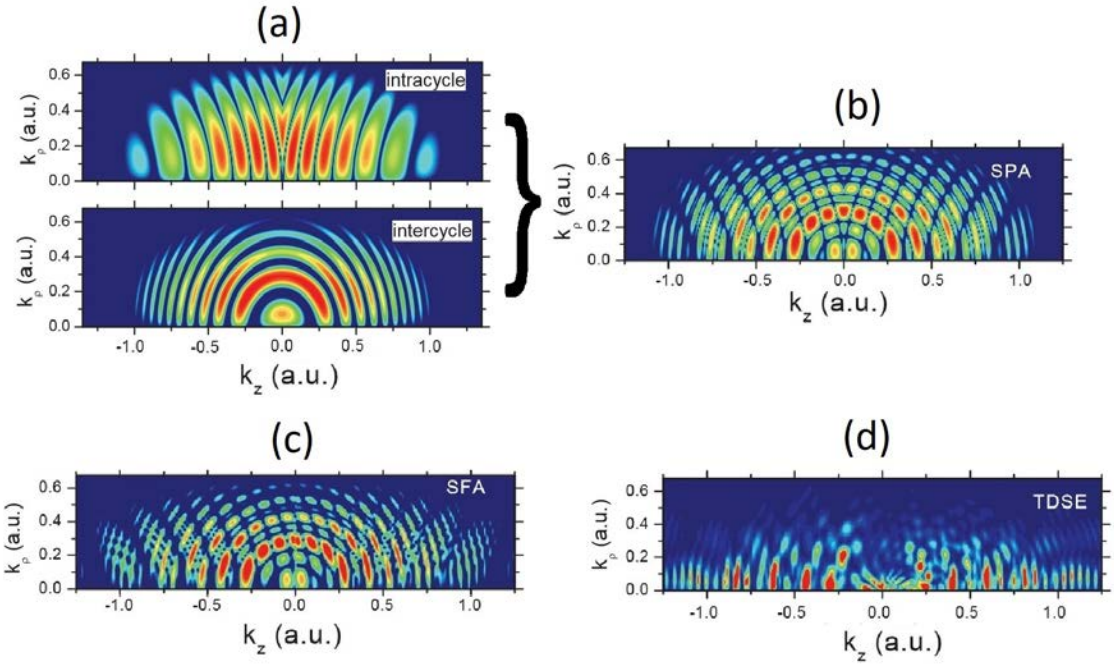

Figura 5.2: Tasa de ionización completa en función de ambas componentes de momento para diversos modelos.

Capítulo 6

Discusión sobre el tiempo de ionización

Como vimos previamente, en el Simple Man's Model la energía del electrón tiene una discontinuidad desde su estado ligado con energía $-I_p$ al continuo con energía cero, ya que en el mismo el tuneleo es instantáneo, con un ancho de la barrera nulo. Por el contrario, en el modelo cuasiclásico presentado en este trabajo, el electrón tiene permitido adquirir momentos y posiciones complejas bajo la barrera, cuyo ancho no es nulo, siempre y cuando emerja de la misma con dichas magnitudes reales. A su vez, se interpreta que el electrón transita debajo de la barrera en tiempos complejos, en donde su parte real está fija (y será el tiempo en el cual el mismo emerja de la barrera), mientras que su parte imaginaria varía desde τ_T hasta 0, siendo $t_i = t_0 + i\tau_T$ el denominado "tiempo de ionización", solución de la ecuación (3.20). Allí es donde comienza la dinámica.

Por otro lado, el hecho de considerar tiempos complejos garantiza que la energía sea continua siempre. Para $t = t_i$ la energía del electrón será igual a $-I_p$, como se aprecia en la ecuación (4.59), creciendo hasta emerger de la barrera con energía cero.

6.1. Relación del tiempo de ionización con la tasa de ionización

Analicemos ahora los límites de las tasas de ionización. Tomemos el caso $u = 0$ por simplicidad. Si vemos las expresiones para los regímenes de tuneleo (ecuación (4.36)) y multifotónico

(ecuación (4.37)), notemos que podemos reescribirlas como

$$|T|^2 \propto \exp\left(-\frac{4}{3} I_p \tau_T\right), \tag{6.1}$$

para el régimen de tuneleo ($\gamma << 1$), con $\tau_T \simeq \gamma/\omega$, y

$$|T|^2 \propto \exp(-2 I_p \tau_T) \tag{6.2}$$

para el multifotónico ($\gamma >> 1$), en donde $\tau_T \simeq \log(2\gamma)/\omega$. Como podemos apreciar, la forma funcional del argumento de ambas expresiones es la misma. Evidentemente, el tiempo imaginario de ionización τ_T, el cual asociamos al tiempo que pasa el electrón bajo la barrera, adquiere un sentido físico en la expresión de la tasa de ionización. Éste establece una escala de decaimiento, evidenciando que, para ambos límites, la tasa de ionización (el número de electrones que llega al detector) decae exponencialmente con la parte imaginaria del tiempo de ionización. Si se toma $p_\rho \neq 0$, de la ecuación 6.2 se obtiene la expresión más general

$$|T|^2 \propto \exp(-2 I_p \tau_T) \exp(-p_\rho^2 \tau_T), \tag{6.3}$$

de la cual se puede notar que existe además una relación entre el tiempo de ionización y la distribución de momento perpendicular al campo eléctrico.

Para relacionar el caso de tuneleo con el modelo cuasiclásico, reescribimos el argumento de $|T|^2$ en la ecuación (6.1) como

$$I_p \tau_T = \frac{I_p}{E_0}\sqrt{2 I_p} = D_c v_c, \tag{6.4}$$

donde $D_c = \frac{I_p}{E_0}$ es el ancho de la barrera de potencial dada por el campo eléctrico, y $v_c = \sqrt{2 I_p}$ es la velocidad clásica de un electrón con energía total I_p. Si expresamos en estos términos la tasa de ionización en el régimen de tuneleo dado por la ecuación (6.1), obtenemos

$$|T|^2 \propto \exp\left(-\frac{4}{3} D_c v_c\right), \tag{6.5}$$

lo cual nos dice que la probabilidad de tuneleo decae exponencialmente al aumentar el ancho de la barrera de potencial. Esto nos muestra que la dependencia del resultado es idéntica a la de un electrón con momento cinético v_c tuneleando por una barrera de potencial cuadrada de ancho D_c dada por la ecuación (2.16), lo cual es interesante debido a que finalmente se evidencia que la ionización para el régimen $\gamma << 1$ efectivamente se da por efecto túnel, siendo el factor $\frac{4}{3}$ un factor relacionado con la geometría de la barrera.

6.2. Adiabaticidad de la ionización

El parámetro de Keldysh es también llamado *parámetro de adiabaticidad*. La razón de esto es que, así como divide regímenes de tuneleo y multifotónico, también divide regímenes adiabático y no adiabático, en donde la adiabaticidad del proceso refiere a que el electrón se escapa por efecto túnel a un tiempo de ionización determinado a través de una barrera de potencial estática, lo cual conlleva a la independencia de la tasa de ionización con la frecuencia del láser. Reescribiendo al parámetro de Keldysh como un cociente de tiempos, expresado en la ecuación (1.2), si $\gamma << 1$, clásicamente el electrón tunelea más rápido que lo que tarda el campo eléctrico en oscilar, siendo afectado muy poco por el movimiento de la barrera, interpretándose esto como un comportamiento adiabático del sistema. Por otro lado, para $\gamma >> 1$ el tiempo característico de la dinámica es mucho mayor al período de oscilación del láser, por lo que la dinámica del electrón se ve alterada mayormente por el movimiento de la barrera, y es entonces altamente no adiabática. Analicemos la adiabaticidad en cada régimen en términos de la dependencia del comportamiento de la probabilidad de ionización con respecto a la frecuencia del láser.

Para el régimen de tuneleo, la expresión para la parte imaginaria del tiempo de ionización es $\tau_T \simeq \frac{\sqrt{2I_p}}{E_0}$, la cual es independiente de la frecuencia coincidiendo con el tiempo de ionización para el caso estático dado por la ecuación (2.23). Esto lleva a una tasa de ionización también independiente de la frecuencia de la forma

$$|T|^2 \propto \exp\left[-\frac{2}{3}\frac{(2I_p)^{\frac{3}{2}}}{E_0}\right], \tag{6.6}$$

la cual coincide con la ecuación (2.32) en los cálculos de ionización por efecto túnel en una barrera estática [23, 41].

Por el contrario, el comportamiento en el régimen multifotónico ($\gamma >> 1$) es, según la ecuación (3.27),

$$\tau_T \simeq \frac{\ln(\gamma)}{\omega}, \tag{6.7}$$

con lo que se aprecia que el tiempo de ionización tiene una fuerte dependencia con la frecuencia, como también su tasa de ionización,

$$|T|^2 \propto I^{\frac{I_p}{\omega}}. \tag{6.8}$$

En la figura 6.1 podemos apreciar el comportamiento de la tasa de ionización en función de la

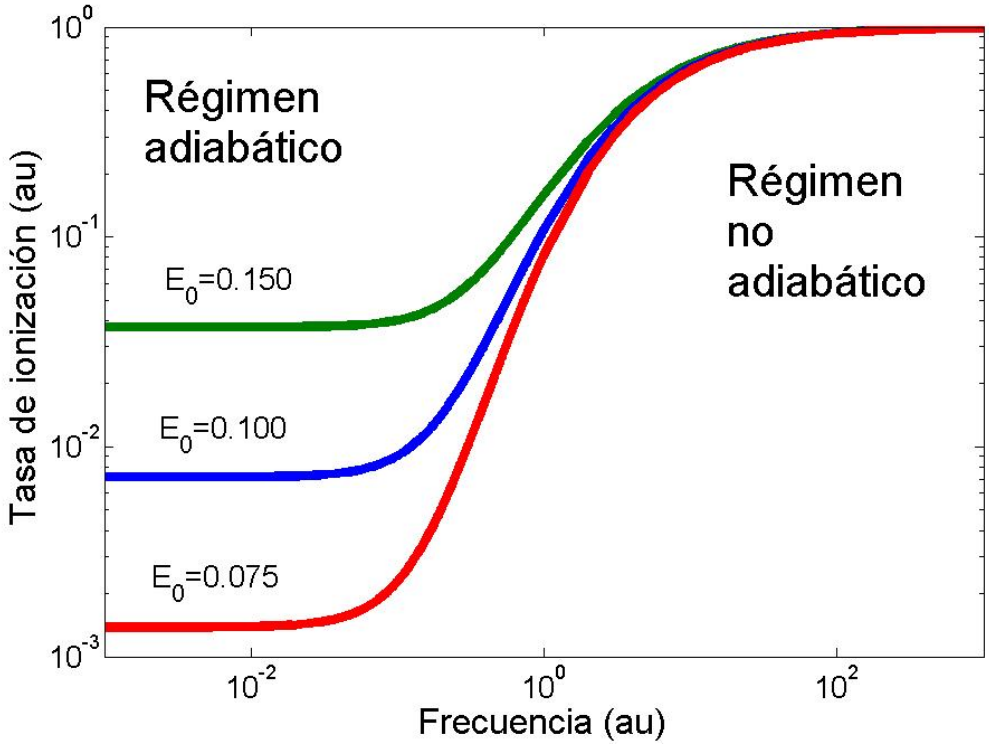

Figura 6.1: Tasa de ionización en función de la frecuencia ω para tres valores distintos de amplitud de campo eléctrico, con $I_p = 0{,}5$.

frecuencia del láser, dado por la ecuación (4.35). En el gráfico se realiza una comparación para tres valores fijos distintos de amplitud de campo eléctrico E_0, con un potencial de ionización $I_p = 0{,}5$ (hidrógeno). Se puede apreciar que para valores de $\omega < 10^{-2}$ la tasa de ionización es constante, lo cual evidencia que en dicho régimen la misma es independiente de la frecuencia y por lo tanto el sistema presenta un comportamiento adiabático. La tasa de ionización, a I_p constante, dependerá únicamente de E_0 según la ecuación (6.6). Para frecuencias mayores, la tasa de ionización adquiere una fuerte dependencia con ω, presentando un comportamiento completamente no adiabático. Para ω tendiendo a infinito, la misma tiende a 1 independientemente del valor del campo según la ecuación (6.8). De igual forma, en la figura 6.2 se grafica la parte imaginaria del tiempo de ionización τ_T en función de la frecuencia, evidenciando el mismo comportamiento respecto a la adiabaticidad que la tasa de ionización.

Otra forma de analizar la adiabaticidad en el contexto del modelo semiclásico es estudiar la dinámica del electrón bajo la barrera, analizando la expresión de la distancia recorrida por

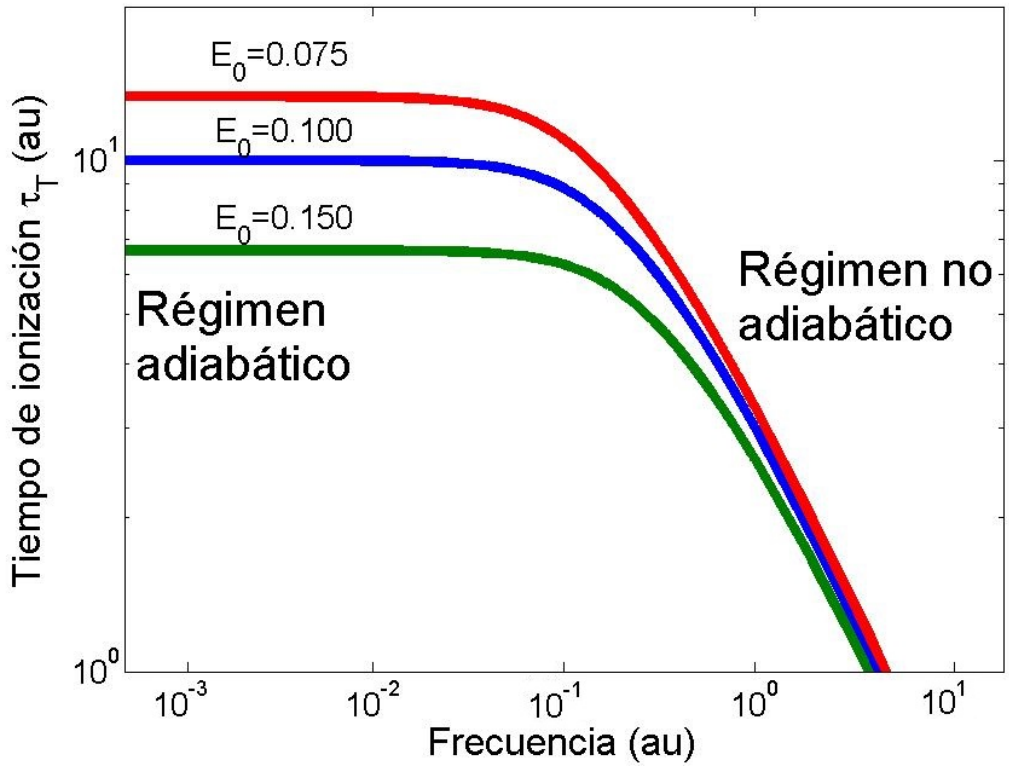

Figura 6.2: Parte imaginaria del tiempo de ionización en función de la frecuencia ω para tres valores distintos de amplitud de campo eléctrico, con $I_p = 0{,}5$.

el mismo. Para el límite de tuneleo se deriva la siguiente expresión para la distancia recorrida bajo la barrera

$$D \simeq \frac{I_p}{E_0} = \frac{v_c}{2}\tau_T. \tag{6.9}$$

La misma expresa que el electrón viajando con velocidad $v_c/2 = \sqrt{2I_p}/2$ (la cual es la velocidad media del electrón bajo la barrera en este régimen según la ecuación (4.30)) tarda un tiempo igual a τ_T. Es decir, la dinámica efectiva bajo la barrera no depende de la frecuencia del láser y por ende es adiabática.

Por otro lado, en el régimen multifotónico la distancia recorrida bajo la barrera se puede escribir como

$$D \simeq \frac{\sqrt{2I_p}}{\omega} \propto \frac{v_c}{2}T_0. \tag{6.10}$$

Se puede apreciar que si el electrón viaja con la misma velocidad que el caso anterior, el tiempo que tarda en recorrer dicha distancia ahora será proporcional a un período del láser.

Efectivamente, en este regímen, la dinámica del electrón está fuertemente supeditada a la oscilación del láser, por lo cual se evidencia que el régimen multifotónico es altamente no adiabático.

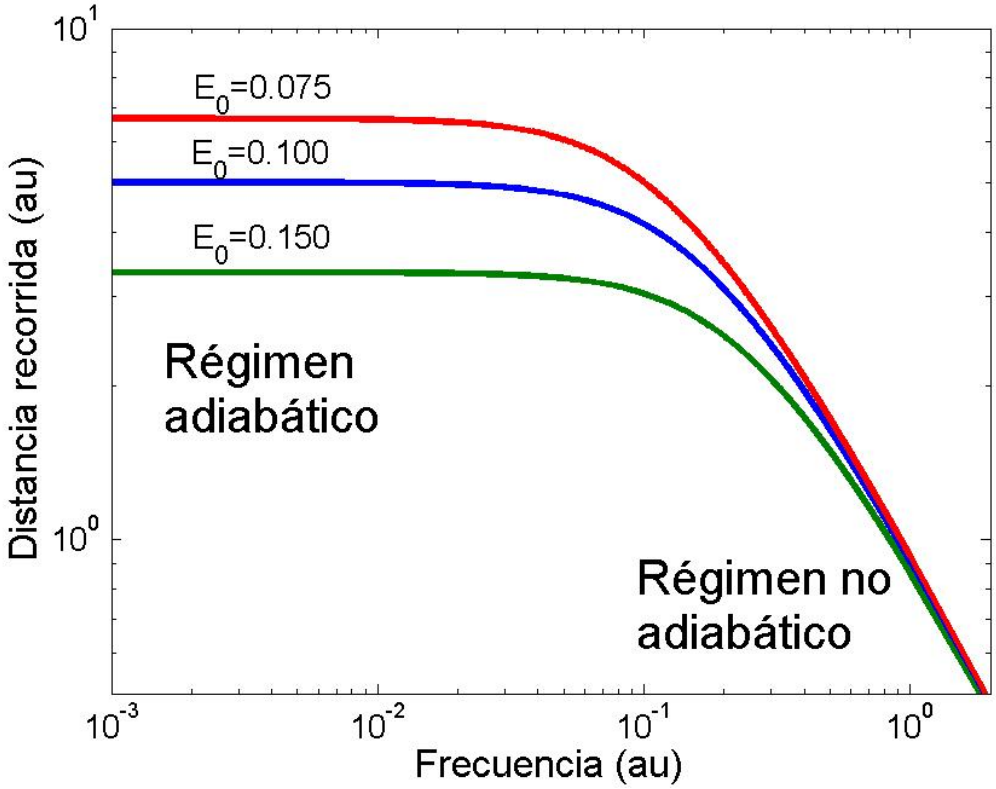

Figura 6.3: Distancia recorrida por el electrón bajo la barrera en función de la frecuencia para tres valores distintos de amplitud de campo eléctrico, con $I_p = 0{,}5$.

En la figura 6.3 graficamos la expresión completa para la distancia recorrida por el electrón bajo la barrera, dada por la ecuación (4.25). Se aprecia que para frecuencias bajas, coincidente con el régimen de tuneleo (adiabático), la distancia es independiente de la frecuencia, y sólo depende del valor de E_0 según la ecuación (6.9). Se ve que cuando la frecuencia sube la distancia que el electrón transita debajo de la barrera baja sustancialmente, tendiendo a cero para frecuencias $\omega \to \infty$. Para el régimen de frecuencias altas, es decir, régimen multifotónico, el comportamiento del sistema es altamente dependiente de ω, pero no depende de la amplitud del campo eléctrico, tal como expresa la ecuación (6.10). Es por ello que en dicho régimen las curvas tienden a converger entre sí.

En resumen, el hecho de que durante el tuneleo la parte real del tiempo se mantenga

constante implica que, bajo las aproximaciones realizadas en este modelo, la ionización atómica sea instantánea en el eje real temporal, por lo cual no se predice un retardo temporal real debido al tránsito del electrón bajo la barrera. De igual manera, éste es un tema de discusión actual en la física de fenómenos ultrarrápidos debido a que se están realizando experimentos con pulsos láser subfemtosegundo. Esto lleva a medir procesos temporales del órden de magnitud de escalas atómicas, llevando a diversas mediciones sobre el tiempo de retardo del electrón bajo la barrera, con múltiples interpretaciones y controversias [29, 30].

Capítulo 7

Conclusiones

En el presente trabajo se ha realizado un estudio del proceso de fotoionización atómica por láseres intensos. En el contexto de las aproximaciones de campo fuerte y de punto silla se ha desarrollado una teoría cuasiclásica para la ionización atómica por efecto túnel, haciendo hincapié en el estudio de la ionización para tiempos cercanos a los máximos de campo eléctrico, cuando la ionización es máxima. Se han derivado expresiones de trayectorias y velocidades del electrón transitando la región bajo la barrera, siendo ambas complejas. El electrón transita tiempo complejo mientras está debajo de la barrera, emergiendo de la misma en un tiempo real igual a la parte real del tiempo de ionización. A partir de allí, las trayectorias y velocidades son puramente reales como es de esperar. Además, se obtuvo una expresión para la distancia recorrida por el electrón debajo de la barrera, que se puede interpretar como el ancho efectivo de la barrera para el caso en el que la misma oscila con el tiempo, que en el límite de tuneleo coincide con el ancho de la barrera estática. Además, para $\gamma = 0$ se recupera el Simple Man's Model, el cual asume que dicha distancia es nula. Por otro lado, para frecuencias muy altas la misma tiende a cero, evidenciando un régimen multifotónico altamente dependiente de la frecuencia. Adicionalmente se realizó un análisis de la energía del electrón en todo el proceso, en donde se observó que la energía cinética presenta una discontinuidad en el tiempo de ionización. Sin embargo, el hecho de considerar tiempos complejos hace que la energía mecánica total sea continua para todo tiempo, lo cual no sucede en el SMM. Se hizo además un análisis de la dependencia exponencial de la tasa de ionización en los límites de tuneleo y multifotónico, obteniendo resultados que coinciden con los bibliográficos [23, 24, 41]. Se ha observado que,

tanto para frecuencias como para campos altos la misma tiende a 1. Sin embargo, para campos pequeños la misma tiende a 0, pero para frecuencias bajas la misma tiende a un valor constante independiente de la frecuencia, evidenciando que el límite de tuneleo se trata de un régimen adiabático.

Luego se ha estudiado el aspecto semiclásico del proceso de fotoionización. Las trayectorias interfieren cuánticamente dando una expresión para la tasa de ionización del sistema al estilo de las integrales de camino de Feynman, que involucra interferencias entre trayectorias nacidas en los dos tiempos de ionización de cada ciclo del láser (intraciclo) e interferencias entre trayectorias con tiempos de ionización de distintos ciclos (interciclo).

Posteriormente, se ha realizado un análisis de los tiempos de ionización. El carácter cuántico del proceso de ionización en su comienzo (efecto túnel) es el responsable de que la acción posea parte imaginaria no nula, la cual lleva a un decaimiento exponencial de la tasa de ionización típico para una barrera de potencial. En el contexto de la dinámica cuasiclásica es necesario que transcurra tiempo complejo cuando el electrón transite bajo la barrera, lo que se traduce en la continuidad de la energía mecánica total del electrón. Además, la parte imaginaria del tiempo de ionización establece una escala de decaimiento en la tasa de ionización para los límites multifotónico y de tuneleo, relacionada también con la distribución de momento perpendicular al láser. Sin embargo, esto no implica que efectivamente haya un retardo temporal en la ionización. Mientras el electrón penetra la barrera, la parte real del tiempo se mantiene fija y su parte imaginaria varía desde τ_T hasta 0. Al anularse la parte imaginaria del tiempo, el electrón emerge de la barrera. Por ello, la parte real del tiempo que tarda el electrón en atravesar la barrera es nulo. De igual manera, esto es motivo de diversas discusiones y controversias [29, 30].

Finalmente, estudiando las expresiones del tiempo de ionización, de la distancia recorrida bajo la barrera y de la tasa de ionización se ha verificado que en el límite de tuneleo el proceso de fotoionización es adiabático, ya que se evidencia una independencia respecto a la frecuencia del láser. Por el contrario, la dinámica de ionización atómica en el límite multifotónico presenta una alta dependencia con la frecuencia del láser, siendo éste un régimen altamente no adiabático.

Este modelo se podría mejorar al introducir el efecto del potencial coulombiano en la dinámica, el cual fue despreciado al considerar la aproximación de campo fuerte [51, 52, 53, 54, 55, 56]. Esto llevaría a la modificación de las expresiones de tiempos de ionización y de trayectorias, ya

que la barrera de potencial se vería distorsionada respecto a la considerada en este trabajo.

Apéndice A

Unidades atómicas

A lo largo del presente trabajo se utilizó el sistema de unidades conocido como *sistema de unidades atómicas de Hartree*. El mismo es muy conveniente y utilizado cuando se trabaja en física atómica.

Para este sistema, se fijan tres constantes a uno. Las mismas son

$$\hbar = m_e = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} = 1. \tag{A.1}$$

Allí, $\hbar$ es la constante de Planck reducida, m_e es la masa del electrón, e es su carga y ε_0 es la permitividad del vacío. Además, cuando se trabaja en este sistema de unidades también se suelen utilizar unidades gaussianas, las cuales fijan $4\pi\varepsilon_0 = 1$. Esto hace que las unidades atómicas fijen la carga del electrón a uno, por lo que vale entonces $e = m_e = 1$. En la tabla A.1 se presentan algunas unidades derivadas de este sistema.

Con estas consideraciones, podemos escribir el potencial coulombiano en unidades atómicas como

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{1}{r}, \tag{A.2}$$

que es la expresión del potencial utilizado en el trabajo.

Magnitud	Nomenclatura	Expresión	Valor
Longitud	a_0 (radio de Bohr)	$\frac{\hbar}{m_e e^2}$	0,53 A
Tiempo	t_0	$\frac{m_e a_0^2}{\hbar}$	24,1 as
Frecuencia	ν_0	$\frac{1}{t_0}$	41 PHz
Energía	ϵ_0	$\frac{\hbar^2}{m_e a_0^2}$	27,2 eV
Velocidad	v_0	$\frac{\hbar}{m_e a_0}$	$2{,}2 \times 10^6$ m/s
Campo eléctrico	E_0	$\frac{e}{a_0^2}$	$5{,}1 \times 10^{11}$ V/m

Tabla A.1: Unidades atómicas.

Apéndice B

Barrera de potencial cuadrada

En este apéndice resolveremos el caso unidimensional de un electrón en presencia de una barrera de potencial rectangular de espesor a y altura $V_0 > 0$, graficado en la figura 2.3. Siendo E la energía del electrón, nos centramos en dos casos:

- $E < V_0$ (clásicamente prohibido),
- $E > V_0$ (clásicamente permitido).

La ecuación que rige la dinámica del electrón es la ecuación de Schrödinger, cuya versión independiente del tiempo es

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x), \tag{B.1}$$

en donde la expresión del potencial es

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a, \\ \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \tag{B.2}$$

Resolvemos la ecuación proponiendo soluciones para las regiones $x < 0$ y $x > a$, ya que nos interesa ver la probabilidad que posee el electrón de atravesar la barrera, o de rebotar en la misma. Supongamos que su movimiento es desde valores de x negativos hacia valores positivos,

es decir, de izquierda a derecha. Para ello, se propone la solución

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{ik_i x} + Re^{-ik_i x} & x < 0, \\ \\ Te^{ik_i x} & x > a, \end{cases} \tag{B.3}$$

con R y T coeficientes complejos. Dicha solución representa, en la región previa a la barrera, una onda plana que, en parte se propaga hacia la derecha, y en parte a la izquierda, reflejándose. Esta última posee un coeficiente R, siendo $|R|^2$ la probabilidad de reflexión de la onda. De la misma forma, a la derecha de la barrera la solución representa una onda plana con un coeficiente T, siendo $|T|^2$ la probabilidad de transmisión de la onda a través de la barrera.

Al reemplazar en la ecuación de Schrödinger, imponiendo la continuidad de la función de onda y de su derivada para $x = 0$ y $x = a$ se despejan dichos coeficientes, para cada caso. Con $k_i = \sqrt{2E}$, y $k_f = \sqrt{2(V_0 - E)}$, para el caso $E > V_0$ los coeficientes valen [41]

$$\begin{cases} |R|^2 = \frac{(k_i^2 - k_f^2)^2 \sin^2(k_f a)}{4k_i^2 k_f^2 + (k_i^2 - k_f^2)^2 \sin^2(k_f a)}, \\ \\ |T|^2 = \frac{4k_i^2 k_f^2}{4k_i^2 k_f^2 + (k_i^2 - k_f^2)^2 \sin^2(k_f a)}, \end{cases} \tag{B.4}$$

mientras que para el caso $E < V_0$, toman los valores

$$\begin{cases} |R|^2 = \frac{(k_i^2 + k_f^2)^2 \sinh^2(k_f a)}{4k_i^2 k_f^2 + (k_i^2 + k_f^2)^2 \sinh^2(k_f a)}, \\ \\ |T|^2 = \frac{4k_i^2 k_f^2}{4k_i^2 k_f^2 + (k_i^2 + k_f^2)^2 \sinh^2(k_f a)}. \end{cases} \tag{B.5}$$

Notemos que podemos pasar del primer caso al segundo si reemplazamos k_f por $-ik_f$, es decir, permitiendo al sistema poseer valores de momento imaginarios. Además, para el primer caso, a pesar de que la partícula posee un valor de energía mayor al de la barrera, de igual manera hay una probabilidad no nula de que la misma rebote, siendo también éste un efecto puramente cuántico.

Apéndice C

Dinámica de un electrón libre en un campo eléctrico oscilante

En este apéndice analizaremos la dinámica de un electrón bajo la influencia del campo eléctrico. Consideremos un hamiltoniano de un electrón libre en presencia de un campo eléctrico en aproximación dipolar

$$H = \frac{1}{2}(\vec{p} + \vec{A}(t))^2 - \phi(\vec{r}, t). \tag{C.1}$$

En esta expresión, $\vec{A}(t)$ es el potencial vector que cumple $\vec{E}(t) = -\frac{\partial \vec{A}(t)}{\partial t}$ y $\phi(\vec{r}, t)$ es el potencial escalar.

Aquí podemos realizar dos elecciones. Si tomamos $\phi(\vec{r}, t) = 0$, la expresión del hamiltoniano es

$$H_V = \frac{p^2}{2} + \vec{p}.\vec{A}(t) + \frac{1}{2}A^2(t). \tag{C.2}$$

Esta elección se denomina *gauge de Velocidad*. Otra posible elección es tomar $\vec{A}(t) = 0$ y $\phi(\vec{r}, t) = -\vec{E}(t).\vec{r}$. Con esta elección, el hamiltoniano queda

$$H_L = \frac{p^2}{2} + \vec{E}(t).\vec{r}, \tag{C.3}$$

y se denomina *gauge de longitud*.

Sin ninguna aproximación adicional, ambos gauges son equivalentes. Esto quiere decir que si consideramos Ψ_L como la solución de la ecuación de Schrödinger para el gauge de longitud, y Ψ_V para el gauge de velocidad, existe una transformación unitaria que lleva de uno al otro,

cuya expresión es

$$\Psi_L = e^{i\vec{r}.\vec{A}(t)}\Psi_V. \tag{C.4}$$

En el presente trabajo utilizamos el gauge de longitud, ya que de esta manera obtenemos una expresión explícita para la barrera de potencial a estudiar. Al resolver la ecuación de Schrödinger para dicho hamiltoniano se obtienen los siguientes autoestados, denominados *estados de Volkov*.

$$\Psi_p^V(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-iS_L(p,t,t')} e^{i[\vec{p}+\vec{A}(t)].\vec{r}}. \tag{C.5}$$

Allí, definimos

$$S_L(\vec{p},t,t') = \frac{1}{2}\int_{t'}^{t} [\vec{p}+\vec{A}(t'')]^2 dt''. \tag{C.6}$$

La misma es la acción clásica de un electrón libre en presencia de un campo eléctrico externo de modo tal que $\vec{p}$ es una constante de movimiento y es el momento generalizado del electrón, relacionándose con el momento cinetico, en el gauge de longitud, con la expresión dada por la ecuación (3.8). De ese modo, se evidencia que la acción es la integral de la energía cinética del electrón entre tiempos t' y t.

Apéndice D

Amplitud de transición en el gauge de velocidad

Para el cálculo de la amplitud de transición en el trabajo se utilizó el hamiltoniano en el gauge de longitud. Si bien ambos gauges son equivalentes en un principio, la aproximación de campo fuerte no es invariante de gauge, por lo que la expresión de la amplitud de transición será distinta. En este apéndice haremos el cálculo para la misma en el gauge de velocidad.

En este gauge, el hamiltoniano queda expresado como

$$H_V = \frac{p^2}{2} + \vec{p}.\vec{A}(t) + \frac{1}{2}A^2(t), \tag{D.1}$$

en donde consideramos el potencial escalar $\phi(\vec{r},t) = 0$, y $\vec{E}(t) = -\frac{\partial \vec{A}(t)}{\partial t}$. El estado de Volkov en este gauge se expresa

$$\Psi_p^V(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i.S_L(p,t,t')} e^{i\vec{p}.\vec{r}}, \tag{D.2}$$

en donde $S_L(p,t,t')$ es la acción de un electrón libre bajo la acción de un campo eléctrico. Por ello, reemplazándolo en la expresión de la amplitud de transición obtenemos

$$T = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-iS(p,t,t')} \langle \vec{p}|H_i|\Phi_g\rangle. \tag{D.3}$$

Allí $S(p,t,t')$ es la acción de un electrón con energía $-I_p$ sometido a un campo eléctrico. El elemento de matriz tiene una expresión analítica, la cual es

$$\langle \vec{p} + \vec{A}(t)|H_i|\Phi_g\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}\pi} \frac{(2I_p)^{5/4}}{(I_p + \frac{1}{2}|\vec{p}|^2)}. \tag{D.4}$$

Notemos que en este gauge, dicho prefactor no tiene una dependencia temporal, por lo cual sale de la integral. Finalmente, la amplitud de transición para el gauge de velocidad queda expresada como

$$T = i\frac{(2I_p)^{5/4}}{\sqrt{2}\pi(I_p + \frac{1}{2}p^2)}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iS(p,t,t')}dt. \tag{D.5}$$

Aquí utilizamos la aproximación de punto silla para aproximar la integral, reemplazándola por una sumatoria sobre los tiempos que hacen la fase estacionaria, que serán los tiempos que dominan la ionización. Dichos tiempos son solución de la ecuación de punto silla (3.15). Haciendo esto, la expresión para la amplitud de transición es

$$T = i\frac{(2I_p)^{5/4}}{\pi(I_p + \frac{1}{2}p^2)(2\tilde{I}_p)^{1/4}}\sum_{SP}\frac{e^{-iS(t_{SP})}}{|E(t_{SP})|^{1/2}}. \tag{D.6}$$

Para un campo eléctrico linealmente polarizado $\vec{E}(t) = E_0\cos(\omega t)\hat{z}$, el denominador de la sumatoria no depende del subíndice, ya que, para todo tiempo de ionización vale

$$E(t_{SP}) = E_0\sqrt{\gamma^2 + 1}. \tag{D.7}$$

Por ello, la expresión final queda

$$T = i\frac{(2I_p)^{5/4}}{\pi(I_p + \frac{1}{2}p^2)(2\tilde{I}_p)^{1/4}}\frac{1}{\sqrt{E_0\sqrt{\gamma^2 + 1}}}\sum_{SP} e^{-iS(t_{SP})}. \tag{D.8}$$

Notemos que el prefactor es distinto para la expresión deducida en el gauge de longitud, dado por la ecuación (3.18). Sin embargo, el comportamiento exponencial del sistema en ambos gauges es el mismo. Por ello, el análisis cualitativo realizado en el trabajo para el gauge de longitud es válido para este gauge. De cualquier manera, en ambos casos el prefactor debe ser corregido dando nota de efectos coulombianos.

Agradecimientos

- A mi director Diego, por todo lo que aprendí y la ayuda este año.
- A toda mi familia, que me apoyó y me dio todo lo que necesité a lo largo de la carrera.
- A los pibes: Martín, Chale, Gonza, Esteban, Dino y Tomy. Gracias por estar en todas.
- A María, Ignacio, Fede, Luciana, Agus y Juan. Nunca pensé que iba a formar un grupo de amigos en la facultad tan increíble.
- A Mundos Paralelos: Martín, Chale y Sofi. Qué pedazo de banda que nos mandamos.
- A todos y todas las de PG. Cada día aprendo más gracias a ustedes. No podría pedir un espacio mejor para formar parte.
- A todos mis alumnos y alumnas de 5to naturales, de 2016 y 2017. Dos cursos hermosos, y de los que estoy seguro que aprendí más de lo que enseñé.
- A los preceptores del colegio: Tomy, Mariano, Lucía. Por bancarme en todas las que pasaron, y por el fútbol-tenis en el laboratorio.
- Y por supuesto nada de esto, ni de muchísimas otras cosas en mi vida existiría sin Agus. Gracias eternas e infinitas.

Bibliografía

[1] Paul, P.M. *et al.* (2001). Observation of a train of attosecond pulses from high harmonic generation. *Science*, 292(5522), 1689-1692.

[2] Hentschel, M. *et al.* (2001). Attosecond metrology. *Nature*, 414(6863), 509-513.

[3] Paulus, G.G. *et al.* (2001). Absolute-phase phenomena in photoionization with few-cycle laser pulses. *Nature*, 414(182), 182-184.

[4] Drescher, M. (2001). Time-resolved atomic inner-shell spectroscopy. *Science*, 291(1923), 803-807.

[5] Kling, M.F y Vrakking, M.J.J. (2008). Attosecond electron dynamics. *Annual Review of Physical Chemistry*, 59(1), 463-492.

[6] Antonio, J.S. (2011). Dinámica de los electrones con pulsos láser ultrarrápidos: hacer cine en attosegundos. *Revista de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales (Esp)*, 105(1), 129-149.

[7] Saito, N *et al.* (2016). Attosecond streaking measurement of extreme ultraviolet pulses using a long-wavelength electric field. *Scientific Reports*, 6(35594). doi:10.1038/srep35594.

[8] Brabec, T. (Ed.). (2008). *Strong Field Laser Physics*. Quebec, Canada: Springer.

[9] Keldysh, L.V. (1965). Ionization in the field of a strong electromagnetic wave. *Soviet Physics JETP*, 20(5), 1307-1314.

[10] Chin, S.L. (2004). From Multiphoton to Tunnel Ionization. En Lin, S.H, Villaeys, A.A, y Fujimura, Y (Eds), *Advances in Multi-Photon Processes and Spectroscopy Vol 16* (pp. 249-271). Canada: World Scientific Press.

[11] Faisal, F. H. M. (1973). Multiple absorption of laser photons by atoms. *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 6(4), L89.

[12] Hurst *et al.* (1979). Resonance ionization spectroscopy and one-atom detection. *Reviews of Modern Physics*, 51(4), 767 .

[13] Javanainen, J, Eberly, J.H y Su, Q. (1988). Numerical simulations of multiphoton ionization and above-threshold electron spectra. *Physical Review A*, 38(7), 3430.

[14] Voronov, G.S y Delone N.B. (1966). Many-photon ionization of the Xenon atom by ruby laser radiation. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 23(1), 54-58.

[15] Agostini, P. *et al.* (1979). Free-Free Transitions Following Six-Photon Ionization of Xenon Atoms. *Physical Review Letters*, 42(17), 1127-1130.

[16] Becker, W. *et al.* (2002). Above-threshold ionization: from classical features to quantum effects. *Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics*, 48(C), 35-98.

[17] Delone, N.B y Fedorov, M.V. (1989). Above Threshold Ionization. *Progress in Quantum Electronics*, 13(4), 267-298.

[18] Ellis, A.M, Feher, M y Wright, T.G. (2005). *Electronic and Photoelectron Spectroscopy.* England: Cambridge University Press.

[19] Uiberacker, M. *et al.* (2007). Attosecond real-time observation of electron tunnelling in atoms. *Nature*, 446(7136), 627-632.

[20] Huang, K, Xia, Q y Fu, L. (2013). Survival window for atomic tunneling ionization with elliptically polarized laser fields. *Physical Review A*, 87(3), 033415 .

[21] Pedatzur, O. *et al.* (2015). Attosecond tunnelling interferometry. *Nature Physics*, 11, 815–819.

[22] Meckel, M. *et al.* (2008). Laser-Induced Electron Tunneling and Diffraction. *Science*, 320(5882), 1478-1482.

[23] Perelomov, A.M, Popov, V.S y Terent'ev, M.V. (1966). Ionization of atoms in an alternating field. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 25(2), 336-343.

[24] Ammosov, M.V, Delone, N.B y Krainov, V.P. (1986). Tunnel ionization of complex atoms and of atomic ions in an alternating electromagnetic field . *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 64(6), 1191.

[25] Blaga, C.I. *et al.* (2009). Strong-field photoionization revisited. *Nature Physics*, 5, 335.

[26] Arbó, D.G. *et al.* (2006). Interference Oscillations in the Angular Distribution of Laser-Ionized Electrons near Ionization Threshold. *Physical Review Letters*, 96(14), 143003.

[27] Tong, X.M y Lin, C.D. (2005). Empirical formula for static field ionization rates of atoms and molecules by lasers in the barrier-suppression regime. *Journal of Physics B*, 38(15), 2593–2600.

[28] Salieres, P. (2001). Feynman's Path-Integral Approach for Intense-Laser-Atom Interactions. *Science, 292(5518)*, 902-905.

[29] Landauer, R y Martin, T. (1994). Barrier interaction time in tunneling. *Reviews of Modern Physics*, 66(1), 217-228.

[30] Mcdonald, C.R. *et al.* (2015). Tunneling time, what is its meaning?. *Journal of Physics: Conference Series*, 594(1), 012019.

[31] Zheltikov, A. (2016). Keldysh parameter, photoionization adiabaticity, and the tunneling time. *Physical Review A, 94*(4). http://dx.doi.org/10.1103/physreva.94.043412

[32] Landsman, A. *et al.* (2013). Tunneling time in ultrafast science is real and probabilistic. *Optica*, 1(5), 343-349.

[33] Torlina, L. *et al.* (2015). Interpreting attoclock measurements of tunnelling times. *Nature Physics*, 11(1), 503–508.

[34] Camus, N. *et al.* (2017). Experimental Evidence for Quantum Tunneling Time. *Physical Review Letters*, 119(2), 023201.

[35] Quantum tunnelling. n.d. En "Wikipedia". Consultado el 07 de noviembre, 2017, desde https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_tunnelling/

[36] Saurabh, S y Kumar, M.J. (2016). *Fundamentals of Tunnel Field-Effect Transistors*. Florida, USA: CRC Press .

[37] Clarke, J y Braginski, A.I. (Ed). (2004). *The SQUID Handbook*. Alemania: WILEY-VCH.

[38] Sutter P. (2007). *Scanning Tunneling Microscopy in Surface Science*. En: Hawkes P.W., Spence J.C.H. (eds) Science of Microscopy. Nueva York: Springer

[39] Griffiths, D.J. (2004). *Introduction to Quantum Mechanics*. (2da ed.). USA: Pearson Prentice Hall.

[40] Reiss, H. (2008). Foundations of the Strong-Field Approximation. En Yamanouchi et. al. (Eds), *Progress in Ultrafast Intense Laser Science III* (pp. 1-31). Berlin, Alemania: Springer.

[41] Landau, L.D y Lifshitz, E.M. (1965). *Quantum Mechanics*. (2da ed.). Inglaterra: Pergamon Press.

[42] Arfken, G.B. (1985). *Mathematical Methods for Physicists*. USA: Academic Press Inc.

[43] Baorui yang, K.J *et al.* (1993). Intensity-dependent scattering rings in high order above-threshold ionization. *Physical Review Letters*, 71(23), 3770.

[44] Paulus, G.G *et al.* (1994). Plateau in above threshold ionization spectra. *Physical Review Letters*, 72(18), 2851.

[45] Arbo, D.G, Lemell, C y Burgdorfer, J. (2015). Signatures of tunneling and multiphoton ionization by short-laser pulses: The partial-wave distribution. *Journal of Physics: Conference Series*, 635(1), 012003.

[46] Krause, J.L, Schafer, K.J y Kulander, K.C. (1992). High-order harmonic generation from atoms and ions in the high intensity regime. *Physical Review Letters*, 68(24), 3535.

[47] Corkum, P.B. (1993). Plasma perspective on strong field multiphoton ionization. *Physical Review Letters*, 71(13), 1994-1997.

[48] Pisanty, E y Ivanov, M. (2016). Slalom in complex time: Emergence of low-energy structures in tunnel ionization via complex-time contours. *Physical Review A*, 93(4), 1-17.

[49] Shvetsov-shilovski, N.I *et al.* (2016). Semiclassical two-step model for strong-field ionization. *Physical Review A*, 94(1), 013415.

[50] Arbó, D.G. *et al.* (2010). Intracycle and intercycle interferences in above-threshold ionization: The time grating. *Physical Review A*, 81(2), 021403(R).

[51] Popruzhenko, S.V y Bauer, D. (2008). Strong field approximation for systems with Coulomb interaction. *Journal of Modern Optics*, 55(16), 2573-2589.

[52] Popruzhenko, S.V., Paulus, G.G y Bauer, D. (2008). Coulomb-corrected quantum trajectories in strong-field ionization. *Physical Review A*, 77(5), 053409.

[53] Yan, T.M. y Bauer, D. (2012). Sub-barrier Coulomb effects on the interference pattern in tunneling-ionization photoelectron spectra. *Physical Review A*, 86(5), 053403.

[54] Maxwell, A.S., Al-Jawahiry, A., Lay X.Y. y Figueira de Morisson Faria, C. (2017). Analytic quantum-interference conditions in Coulomb corrected photoelectron holography. Recuperado de https://arxiv.org/abs/1709.05973.

[55] Arbó, D.G *et al.* (2008). Coulomb-Volkov approximation for near-threshold ionization by short laser pulses. *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physic*s, 77(1), 1-8.

[56] Bauer, J. (2002). A generalization of the Keldysh – Faisal – Reiss model. *Journal of Physics B*, 4075(02), 5131-5140.