

國立交通大學

物理研究所

碩士論文

動量空間方法計算含時薛丁格方程式及多光子電
離現象的研究



Calculation of the time-dependent Schrödinger equation in momentum space and the
study of atomic multiphoton ionization

研究生：吳仁傑

指導教授：江進福教授

中華民國一百年七月

動量空間方法計算含時薛丁格方程式及多光子電離現象的研究

學生：吳仁傑 指導教授：江進福

國立交通大學物理研究所

摘要

利用廣義擬似譜法，將波函數轉換至動量空間下運算，可以節省運算量且與實際值誤差不大，能更為簡便的求得所需的結果。之後更可以將這些完備的波函數運用在其他理論方法上，如微擾理論、SFA 等，提供一個可以簡單快速的計算工具，來判斷電子在強雷射場下的行為，以及光電子游離的情形。

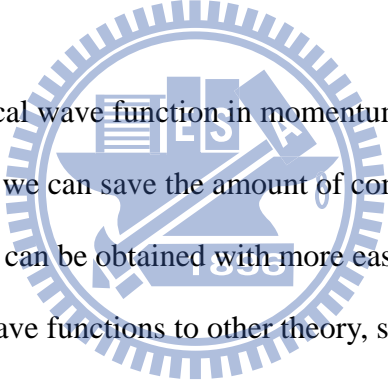
Calculation of the time-dependent Schrödinger equation in momentum space and the study of atomic multiphoton ionization

Student : Ren-Jie Wu

Adviser : Jin-Fu Jiang

**Institute of Physics
National Chiao-Tung University**

Abstract



Quantum mechanical wave function in momentum space with generalized pseudospectral method, we can save the amount of computation and that the error are small, and the result can be obtained with more easily way. Then we can apply those complete set of wave functions to other theory, such as perturbation theory, strong field approximation (SFA), etc., providing a simple and fast calculation tool to determine the motion of photonelectron in a strong laser field.

誌 謝

首先要感謝我的爸爸媽媽，無怨無悔的在我身後支持著我，讓我在大學畢業後能就讀我喜歡的系所，並時常在這兩年來打電話關心我的近況，讓我感受到家庭的溫暖。

能夠順利完成這篇論文必須感謝許多人的幫助，想當初在剛接觸到原子物理這個領域時，一切都是顯得多麼陌生，但在幾次的 meeting 下能夠漸漸步上軌道，並希望能協助江進福教授的研究工作。在這感謝江老師能在這個領域給予龐大的幫助，除了授業解惑之外，在研究道路上指引正確的方向和扎實的觀念，其對於研究的態度更是我們這些學生的模範，連在例假日都經常可以在研究室找到教授與其討論。此外還要大大感謝漢傑學長和世達學長的幫忙，在我面臨學習上的困難時，不斷給予我鼓勵，常常不辭辛勞地幫助我解決問題，讓我順利完成此階段的學業，學長的積極和熱心都讓我由衷的感謝，也是我必須學習的態度。另外還要非常謝謝袁佩宏同學的鼎力相助，每次一些瑣碎的事都跑去問他，都可以給我非常滿意的答案，也希望袁佩宏能夠在博班念得順利。

也要感謝周遭的同學們，伴我度過這碩班的兩年，尤其是我室友們，在我怠惰的時候提醒我該認真了，在我心情煩躁的時候陪我出外走走，如果沒有他們，相信現在的我仍舊一無所成，也要謝謝我的研究夥伴蕭復生同學，能夠時常的互相砥礪和督促，讓我在研究的道路上並不孤單。或許這一切對於他們只是舉手之勞，但是這些幫助如同雪中送炭般的重要，讓我能夠堅持信念繼續走下去，感謝這些曾經幫助我的家人朋友們，感謝你們。

目錄

圖目錄 v

表目錄 vi

第一章 緒論 1

第二章 理論 3

第三章 計算方法 9

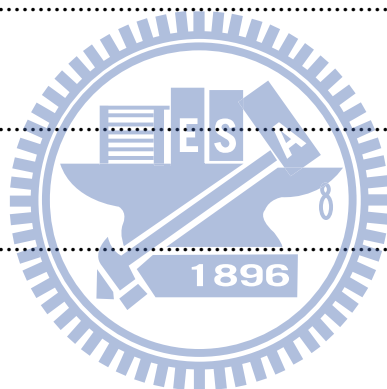
第四章 結果 20

第五章 結論 26

參考資料 27

附錄 A 動力勢能 29

附錄 B $\phi(p)$ 規一化 31



圖目錄

圖 2.1	A. 電子同時吸收四個能量為 $\hbar\omega$ 光子，恰好滿足束縛能 E_{ion} 而游離，這就是多光子電離(multi-photon ionization)；B. 電子吸收除游離需要的四顆光子外，又吸收兩顆光子，會產生閥上電離(ATI)現象，電子在離開原子核時有額外的動量。.....	4
圖 2.2	氫原子的光電子能量游離光譜，在 $\lambda = 1064 \text{ nm}$ 平均雷射電場強度為 10^{14} W/cm^2 。原圖引用自[4]。.....	5
圖 2.3	(A)多光子和二光子游離；(B)共振增強多光子電離.....	6
圖 2.4	(A)多光子電離 (B)隧穿電離 (C)過勢壘電離.....	7
圖 4.1	藍線代表為 $1s$ 波函數在由理論計算後在動量空間下的圖形，星點為用數值方法求得的數值。.....	21
圖 4.2	DDIP： $E_0 = 0.3 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$	23
圖 4.3	(a)、Chu的DIP圖形： $E = 0.3 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$ (b)、數值解的DIP圖形 $E = 0.3 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$	23
圖 4.4	DDIP： $E_0 = 0.5 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$	24
圖 4.5	(a)、Chu的DIP圖形： $E = 0.5 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$ (b)、數值解的DIP圖形： $E = 0.5 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$	24
圖 4.6	DDIP： $E_0 = 1 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$	25
圖 4.7	(a)、Chu的DIP圖形： $E = 1 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$ (b)、數值解的DIP圖形： $E = 1 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$	25

表目錄

表一、ns 能量數值解，解析解和其誤差值.....	20
表二、np 能量數值解，解析解和其誤差值.....	20
表三、從ns→np震子強度:Bethe and Salpeter和數值解的誤差.....	22
表四、從np→ns震子強度:Bethe and Salpeter和數值解的誤差.....	22



第一章 緒論

自雷射發明以來，雷射和原子分子的交互作用一直被廣泛的研究與討論。在近年來，強場雷射與原子交互作用產生一些現象，如高諧波激發和 ATI，許多基本的問題也值得重新思考和討論，如 atomic stability，giant AC-Stark shifts，relativistic effects 等。於是在理論計算上，也發展了一些方法來計算原子系統的性質，如 TDSE 等。但是實際上卻是相當複雜和困難，往往需要大量的計算量才可以仿擬出原來的理論構想，鑒於此緣由，簡化計算過程是一項有意義的工作。

在這篇論文裡，我們主要著重於 TDSE 的計算，我們改良以前的做法，將過去在座標空間下計算 TDSE 轉換至動量空間來計算。除此之外，我們希望能建構相當完善的波函數模型，這當中包含了束縛態和連續態(游離態)的波函數。束縛態(bound state)是原子電子在空間中有限制的運動；連續態是原子電子在空間中較無限制的運動，但也並非毫無限制的運動。有可能會和已游離電子的原子核作用，或是受其他的原子、電子、離子，外部電場等影響。束縛電子的能量一般來說是負值，而自由電子的能量是正值，然而能量為零通常稱為游離門檻(ionization threshold)。

得到準確的波函數是相當重要的，一般我們會認為 TDSE 所計算的數值解與實際解較為貼近，所以一但有其他理論方法被提出來時，我們可以將其結果與 TDSE 的數值解相互做比較，進而確定其理論方法是否可信度高，值得被採納。故 TDSE 算是在新的理論模型建構上不可或缺的重要工具之一。

原子在受到一定頻率的輻射照射下，便會游離出電子，這是光電效應的基本條件之一，搭配近代雷射的發展下，其強度不斷地提升，我們想重新研究原子在受到雷射輻射之後，整個系統接下去的發展，游離電子和中心原子核的相互關係是如何。不管在哪個領域，游離化是相當重要的一個機制，為了得知游離化程度，前人已經建構許許多多的模型和理論，不過電子在游離態的行為，依舊無法準確來描述。在動量空間

TDSE 求得的電子在連續態的波函數，或許可以順利解決這一類的問題，並重新檢視以往的理論模型，加以修改使之更臻於完整。

下面會先簡單介紹原子分子與輻射交互作用的一些基本的理論，藉由了解這些理論，我們可以更深刻感受到在微觀結構下，雷射場會對原子分子帶來何種影響，並有助於培養我們對此領域的物理概念。



第二章 理論

在這裡使用的能量都是幾個電子伏特，並不會牽涉到狹義相對論，故下面討論都是建設在半古典理論(semi-classical theory)的架構下。所謂的半古典就是將輻射場以古典的方式描述，而原子分子以量子描述。

在高功率雷射系統中，我們可以假定有個 500mJ, 50-fs 的脈衝集中在直徑為 5 μm 的範圍裡，它的雷射強度(I)可以高達 $4 \times 10^{19} \text{ W/cm}^2$ ，其相對應的電場(E)是 $2 \times 10^{11} \text{ V/cm}$ 。跟它比起來，對於氫原子來說算是相當大的數量級，因為根據波耳模型，氫原子電場強度(I_a)只有 $3.5 \times 10^{16} \text{ W/cm}^2$ ，對映的電場大小(E_a)只有 $5.1 \times 10^9 \text{ V/cm}$ 。所以當雷射強度接近原子電場強度時，在實驗上量測下，有許多奇特的物理現象被觀察出來，為了瞭解整個系統的運作過程，我們必須一步步了解幾個重要的理論。



動態斯塔克效應 AC-Stark effect

在雷射輻射下，會有幾個不同的效應伴隨著多光子躍遷，其中一個現象就是 AC-Stark effect 造成原子態的偏移。當雷射打入原子後，因為雷射電場的振幅隨時間改變而改變，態的偏移會隨著雷射電場的振幅逐漸增長，而增加過了脈衝峰頂後，就慢慢的遞減直到脈衝的結束。其中特別一個例子是電場振幅呈週期性改變，而這種態的偏移情形我們稱之為動態斯塔克效應 AC-Stark effect。

不過碰到相關的問題時，很難區分何時是共振游離(resonant ionization)或是直接游離(direct/nonresonant ionization)，一般沒有特別說明的情況下，都是以直接游離的情況下來考慮。

多光子電離(multi-photon ionization)(MPI)

束縛電子要游離可以藉由吸收單一顆高頻率光子，即如同光電效應一般，或是同時吸收好幾個低頻率光子來達成游離目的。不過後者需要搭配高輻射電場強度(光子密度)才有可能發生。從微擾理論可以得知，n-光子游離速率 Γ_n 為

$$\Gamma_n = \sigma_n I_L^n$$

σ_n 為多光子截面(generalize multiphoton cross-section)[1]，下標 n 表示吸收 n 個光子，其與原子結構，輻射的頻率和極化有關。n 越大， σ_n 越小； I_L^n 為雷射電場強度。通常電場強度大於 10^{10} W/cm^2 就會產生多光子電離(multi-photon ionization)。[2]

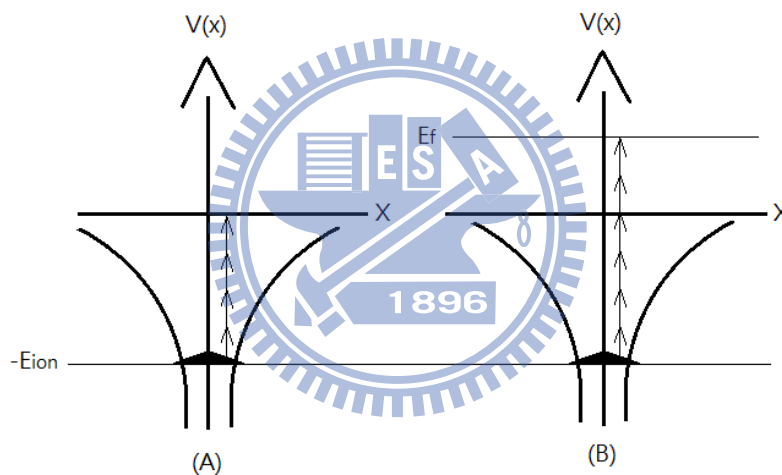


圖 2.1 A. 電子同時吸收四個能量為 $\hbar\omega$ 光子，恰好滿足束縛能 E_{ion} 而游離，這就是多光子電離(multi-photon ionization)；B. 電子吸收除游離需要的四顆光子外，又多吸收兩顆光子，會產生閥上電離(ATI)現象，電子在離開原子核時有額外的動量。

自 1960 年代雷射被發明以來，原子與輻射交互作用的相關研究陸續被探討，Voronov 和 Delone 等更在 1965 年左右開始進行多光子電離(multi-photon ionization)的研究。當低頻率的光子輻射到原子，原子內的電子能藉此獲得能量，當獲得足夠的能量，就能從低能態躍遷到相對較高的能態，在這些能態上，電子依舊被原子核束縛住。

當電子吸收光子的能量超過於原子的游離能 I_p 時，電子就能從原子當中游離出去，並獲得動能 E ，此機制稱為多光子電離 multi-photon ionization，如圖 2.1(A)

$$E = n\hbar\omega - I_p$$

n 為電子從光子得到能量恰好超過原子游離能，所需最少的光子個數。 ω 為光子頻率。

在 1979 年由 Agostini[3] 實驗發現，當輻射強度逐漸增強($10^{12} \sim 10^{14} \text{ W/cm}^2$) 時，游離的電子可以持續吸收光子的能量，如圖 2.1(B) 所示。在光電子游離的能量光譜上，可以看到明顯的波峰，峰與峰的寬度不但相等，恰好對應著輻射光子的能量，這個現象就稱作閥上電離(above-threshold ionization, ATI)，如下圖

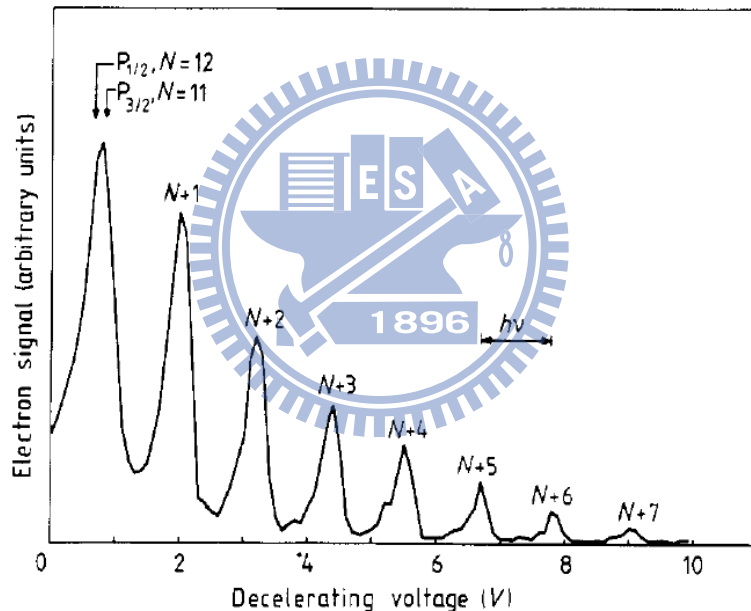


圖 2.2 氬原子的光電子能量游離光譜，在 $\lambda = 1064 \text{ nm}$ 平均雷射電場強度為 10^{14} W/cm^2 。原圖引用自[4]。

不過閥上電離(ATI)還是有欠缺不足的地方，因為現在輻射電場大小是會以一定頻率改變，電子受到電場作用會來回振盪，當電子的振盪頻率大於光子振盪頻率時，就不再是一般單純的閥上電離(ATI)，故我們要討論另外一個可能的游離-隧穿電離(tunneling ionization)。Kruit(1983)表示此時的閥上電離(ATI)是一種非微擾過程，即使此時雷射強度只有 10^{13} W/cm^2 。

一般來說，只要雷射強度 $I \ll I_a$ ，我們可以利用低階微擾理論 lowest order perturbation theory (LOPT) 來計算電子躍遷速率。舉例來說，在計算 n -光子游離從能量 E_i 的初始態 Ψ_i 到能量密度為 $\rho_f(E_f)$ 的連續態，其中 $E_f = \hbar^2 k^2 / (2m)$ ，則 LOPT 躍遷速率為

$$W_{fi}^{(n)} = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) (2\pi\alpha\hbar)^n I^n |T_{fi}^{(n)}|^2 \rho_f(E_f)$$

α 為精細結構常數

$$T_{fi}^{(n)} = \sum_{\kappa_1} \sum_{\kappa_2} \cdots \sum_{\kappa_{n-1}} \frac{\langle \Psi_f | \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{R} | \Psi_{\kappa_{n-1}} \rangle \cdots \langle \Psi_{\kappa_2} | \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{R} | \Psi_{\kappa_1} \rangle \langle \Psi_{\kappa_1} | \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{R} | \Psi_i \rangle}{(E_i + (n-1)\hbar\omega - E_{\kappa_{n-1}}) \cdots (E_i + 2\hbar\omega - E_{\kappa_2})(E_i + \hbar\omega - E_{\kappa_1})}$$

$T_{fi}^{(n)}$ 為 LOPT 躍遷矩陣元素

在這個公式裡，可以看到因選擇規則而禁止的單光子躍遷(如 $1s \rightarrow 2s$)，藉由多光子吸收可以達成。有一點必須注意的是，低階微擾理論(LOPT)並不適用於共振的多光子吸收情況。在共振的情況下，可以用 Feshbach projection operator 方法去計算得到 optical potential。當共振情形出現，通常都是共振影響較大，這種游離另外又稱作為共振增強多光子電離 resonance-enhanced multiphoton ionization (REMPI)，如下圖

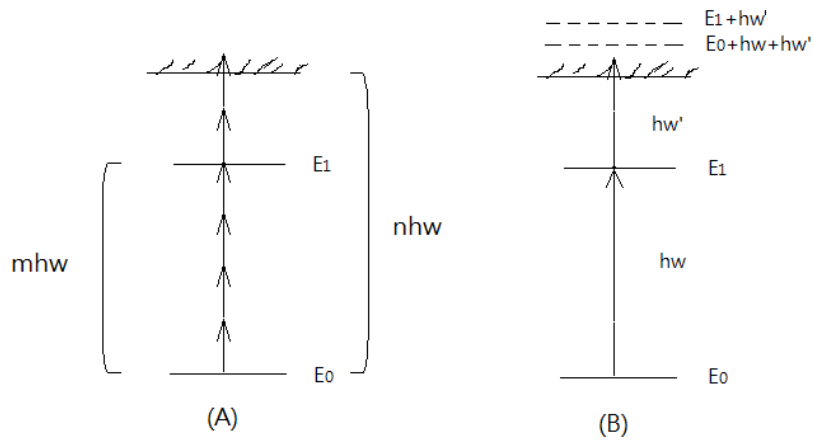


圖 2.3 (A)多光子和二光子游離；(B)共振增強多光子電離

不過，當雷射強度逐漸增強(10^{13} W/cm²)，低階微擾理論(LOPT)計算就不太適用，這時我們得另尋其他適當的近似方法，例如 Volkov wave function，Coulomb Volkov wave，Floquet theory 和數值解 TDSE。

隧穿電離 tunneling ionization

當雷射的強度夠大時($10^{13} \sim 10^{15}$ W/cm²)，庫倫位能會受到雷射電場的微擾而產生變化，位能障壁就好像傾斜一樣，這時候基態電子就像穿過隧道一樣，有一定機率可游離出位能障壁外，這就叫做隧穿電離(tunneling ionization)。當電場大到使位能障壁的鞍點(saddle-point)低於基態的束縛能時，這種情況我們就叫作過勢壘電離(over-the-barrier ionization)。其中有兩個近似方法可以計算電子游離速率- Keldysh theory 和 ADK theory，不過 Keldysh theory 會比實際值少，因為它忽略了庫倫場的效應，然而 ADK theory 卻可以與實驗數據相當接近。

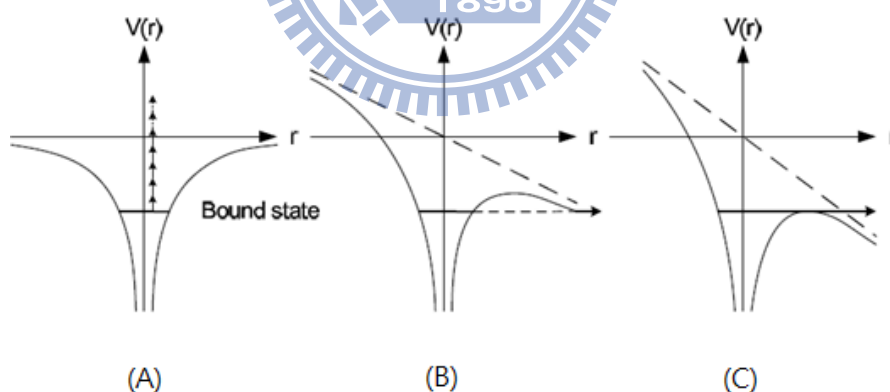


圖 2.4 (A)多光子電離(B)隧穿電離(C)過勢壘電離

動力勢能 ponderomotive potential

原子內的束縛電子會受到外加電場的影響而加速，在原子內部做來回震盪運動，當滿足一定能量，能夠擺脫原子核的束縛而游離，即 tunneling ionization。

動力勢能與帶電粒子在電磁場中震盪的平均動能相等。

假設在真空下，我們有一個電場其可以表示成

$$E(r, t) = E_0(r)\cos(\omega t).$$

ω 為震盪頻率。經過一連串的計算後，我們可以得到動力勢[附錄]

$$U_p = \frac{e^2 I}{2m_e \epsilon_0 c \omega^2}$$

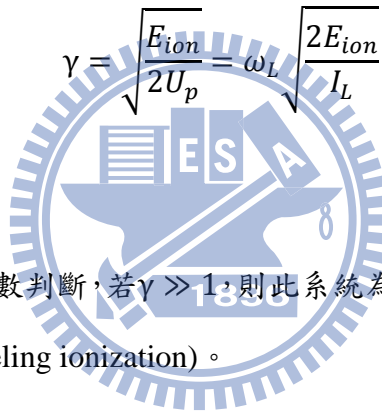
其中 I 為輻射電場強度， ϵ_0 為真空下的介電常數。

則我們可以得到凱耳什參數 γ (Keldysh parameter)

$$\gamma = \frac{\sqrt{E_{ion}}}{\sqrt{2U_p}} = \omega_L \sqrt{\frac{2E_{ion}}{I_L}}$$

其中 E_{ion} 為電子游離能。

我們可以透過凱耳什參數判斷，若 $\gamma \gg 1$ ，則此系統為多光子電離(MPI)；若 $\gamma < 1$ ，則此系統為隧道電離(tunneling ionization)。



第三章 計算方法

首先，考慮一個三維的氫原子薛丁格方程

$$H_0\Psi(\vec{r}) = \left[\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r})$$

其中 $V(\vec{r})$ 為球對稱，所以可替換成 $V(r)$ 。以往的做法是在座標空間下解此方程式，上述方程式可改寫成

$$\begin{aligned} H_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] + V(r) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V(r) \end{aligned}$$

氫原子的波函數在 r 無窮遠處仍會有震盪，故在數值上為了解此方程式，常常會要把 r 取的非常大，以接近實際的情況，但此作法不但繁複困難，而且在計算量也相當大。所以現在我們換個方式，在動量空間下解此薛丁格方程。

利用傅立葉轉換

$$\phi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \exp(-i\vec{p} \cdot \vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r} \quad (1)$$

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \exp(i\vec{p} \cdot \vec{r}) \phi(\vec{p}) d\vec{p} \quad (2)$$

原 time-independent 薛丁格方程式

$$\left[\frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

兩邊同乘以 $(2\pi)^{-3/2} \exp(-i\vec{p} \cdot \vec{r})$ 然後再對整個空間積分，我們發現使用(1)之後

$$\frac{p^2}{2} \phi(\vec{p}) + (2\pi)^{-3/2} \int \exp(-i\vec{p} \cdot \vec{r}) V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r} = E \phi(\vec{p})$$

接著使用(2)，可得

$$\left[\frac{p^2}{2m} - E \right] \phi(\vec{p}) = - \int \bar{V}(\vec{p} - \vec{q}) \phi(\vec{q}) d\vec{q} \quad (3)$$

上述方程式為在動量空間下的薛丁格方程。其中

$$\bar{V}(\vec{p} - \vec{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \exp[-i(\vec{p} - \vec{q}) \cdot \vec{r}] V(\vec{r}) d\vec{r} \quad (4)$$

因為在座標空間下， $\Psi(\vec{r})$ 可以用球座標表示。相同地，動量座標下的波函數可

以表示成(附錄 B)

$$\phi(\vec{p}) = F_{n,l}(p) Y_{l,m}(\theta, \varphi) \quad (5)$$

另外，我們也可以把 $\bar{V}(|\vec{p} - \vec{q}|)$ 用勒讓得多項式展開

$$\bar{V}(|\vec{p} - \vec{q}|) = \sum_{l=0}^{\infty} T_l(p, q) P_l(x) \quad (6)$$

其中 $x = \vec{p} \cdot \vec{q} / (pq)$ 以及 $T_l(p, q) = \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 P_l(x) \bar{V}(|\vec{p} - \vec{q}|) dx$

將(5)(6)代入(3)中，則結果變成

$$\left[\frac{p^2}{2m} - E \right] F_{n,l}(p) = - \int_0^{\infty} q^2 K_l(p, q) F_{n,l}(q) dq \quad (7)$$

其中

$$K_l(p, q) = 2\pi \int_{-1}^1 \bar{V}(|\vec{p} - \vec{q}|) P_l(x) dx \quad (8)$$

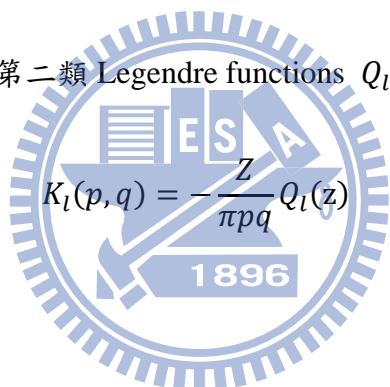
故考慮氫原子系統時，將庫倫位能 $V(\vec{r}) = -Z/\vec{r}$ 代入(4)，我們即可得到

$$\bar{V}(Q) = -\frac{Z}{2\pi^2} \frac{1}{Q^2} \quad (9)$$

其中 $Q = |\vec{p} - \vec{q}|$ 。然後再將(9)代入(8)

$$\begin{aligned} K_l(p, q) &= -\frac{Z}{\pi} \frac{1}{2pq} \int_{-1}^1 \frac{1}{\left(\frac{p^2+q^2}{2pq}\right) - x} P_l(x) dx \\ &= -\frac{Z}{\pi} \frac{1}{pq} Q_l\left(\frac{p^2+q^2}{2pq}\right) \end{aligned}$$

我們可以將 $K_l(p, q)$ 可以用第二類 Legendre functions Q_l 表示



$$K_l(p, q) = -\frac{Z}{\pi pq} Q_l(z) \quad (10)$$

其中

$$Q_l(z) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{1}{z-x} P_l(x) dx \quad z = \frac{p^2+q^2}{2pq}$$

這裡 $P_l(x)$ 為第一類勒讓德方程 (Legendre function of the first kind)。不過，當

$z = 1 (p = q)$ ，在 $Q_l(z)$ 會產生奇異點。所以為避免數值計算上的困難，我們用 Lande'

subtraction technique 將 $\int q^2 K_l(p, q) F_{n,l}(q) dq$ 改寫。

Lande' subtraction technique

在動量空間下解薛丁格方程式雖然是個很好的方法，不過在庫倫位能項會遇到第二類勒讓德方程在 $z = 1$ 分母為零的情形，也就是所謂的奇異點，這會造成在計算波函數時，不易得到精準的值，也就喪失了在動量空間下解薛丁格方程式的好處了。為了避掉奇異點，Lande' subtraction technique 提供一個聰明的方法。

$$\begin{aligned} & \int q^2 K_l(p, q) F_{n,l}(q) dq \\ &= p^2 F_{n,l}(p) \int \frac{K_l(p, q)}{P_l(z)} dq + \int K_l(p, q) \left[q^2 F_{n,l}(q) - \frac{p^2 F_{n,l}(p)}{P_l(z)} \right] dq \end{aligned} \quad (11)$$

其中我們令

$$S_l(p) = F_{n,l}(p) \int \frac{K_l(p, q)}{P_l(z)} dq \quad (12)$$

當 p 趨近 q 時，中括號裡頭的值比 $K_l(p, q)$ 更快為零，所以我們可以視為當 $p \rightarrow q$ 時，(10)式等號右邊第二個積分中的 $K_l(p, q)$ 為零，即可以令

$$v_l(p, q) = \begin{cases} 0, & p = q \\ K_l(p, q), & p \neq q \end{cases} \quad (13)$$

所以，(10)式等號右邊第二個積分

$$\int v_l(p, q) q^2 F_{n,l}(q) dq - p^2 u_l(p)$$

其中

$$u_l(p) = F_{n,l}(p) \int \frac{v_l(p, q)}{P_l(z)} dq \quad (14)$$

則原方程式(7)

$$\left[\frac{p^2}{2m} - E + p^2(S_l(p) - u_l(p)) \right] F_{n,l}(p) = - \int q^2 v_l(p, q) F_{n,l}(q) dq$$

利用(10)(12)(13)(14)我們就可以將上式化簡成特徵值問題，通常這個做法比較適當。

不過我們還可以有別的做法。一樣，我們將庫倫位能代入(4)，不過在積分前，先依照 $p \neq q$ 和 $p = q$ 這兩種情況將被積函數做調整，再執行積分到動量空間，我們可以得到

$$\bar{V}(Q) = \begin{cases} \frac{\cos(QR) - 1}{2\pi^2 Q^2}, & \text{if } Q \neq 0 \\ \frac{-R^2}{4\pi^2}, & \text{if } Q = 0 \end{cases} \quad (15)$$

其中 $Q = |\vec{p} - \vec{q}|$ ， R 為氫原子位能在數值計算上，使 $\psi(\vec{r})$ 能夠吻合實際波函數圖形所需要最大的距離。所以我們知道，與 Lande' subtraction 最大的差異就在於我們必須決定適當的 R 值，否則我們很容易造成計算上的損失。

之後，我們將 $\bar{V}(Q)$ 用勒讓得多項式展開，即

$$\begin{aligned} \bar{V}(|\vec{p} - \vec{q}|) &= \sum_{l=0}^{\infty} a_l(\vec{p}, \vec{q}) P_l(\cos\gamma) \\ a_l(p, q) &= \frac{2l+1}{2} \int_{-1}^1 \bar{V}(|\vec{p} - \vec{q}|) P_l(x) dx \end{aligned} \quad (16)$$

其中 γ 為 \vec{p} 和 \vec{q} 的夾角，且 $x = \cos\gamma$

我們將(15)代入(17)來取得只由動量 p 和 q 所組成的參數 $a_l(p, q)$ ，上述積分可以用高斯積分(Gaussian quadrature)來控制精準度。現在我們可以看到奇異點(singularity)只會發生在 $p = q$ 且 $\gamma = 0$ 時。所以對我們來說，上述的積分並不會對我們造成任何困難。

將(8)代入(7)，再用(16)得到 $a_l(p, q)$ 的形式，就會變成

$$\left[\frac{p^2}{2m} - E \right] F_{n,l}(p) + \frac{4\pi}{2l+1} \int_0^{p_{max}} a_l(p, q) F_{n,l}(q) q^2 dq = 0$$

廣義擬似譜法 Generalized pseudospectral method

接下來，把動量空間薛丁格方程轉變為解特徵值問題。因為電子動能絕大部分都是有限值，故我們可以很放心的判斷波函數在動量空間下會被侷限在一個有限的體積，只要選定的 p_{max} 足夠實際電子運動的最大動能。藉由解決特徵值問題，我們可以得到一組完備的函數可以描述我們要的波函數，這種方法就叫做廣義擬似譜法 Generalized pseudospectral method。

從座標空間的氫原子波函數可以得知，在 r 比較小的範圍震盪比較劇烈，故在選擇動量格點時，我們相對也較傾向於在動量較小的時候切割多一點格點。我們把值域 $x \in [-1, 1]$ 映射到 $[0, p_{max}]$ 利用

$$p(x) = L \frac{1+x}{1-x+\alpha}$$

當中 $\alpha = 2L/p_{max}$ ， L 為映射參數。當 L 越小的時候，可以在 p 小的值取較密的分割點。在這裡我們透過 Gauss–Legendre–Lobatto quadrature 來選定 $\{x_k\}$ 和相對應的 $\{\omega_k\}$ ，其中 $\{x_k\}$ 和 $\{\omega_k\}$ 為勒讓得多項式的零點和所對應的權重。當然亦可以選擇高斯積分 (Gaussian quadrature) 來取點，只是就庫倫位能來說，前者的數值會更精確。有了這些分格點之後，動量空間薛丁格方程就可以寫成

$$\left[\frac{p_i^2}{2m} - E \right] F_{n,l}(p_i) + \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{j=1}^N \omega_j a_l(p_i, q_j) F_{n,l}(q_j) q_j^2 q'(x_j) = 0$$

$$i = 1, 2, 3, \dots, N;$$

其中 $q_j = p(x_j)$ ， $q'(x_j) = p'(x_j)$

分別求出特徵值和特徵向量之後，其各別代表的是束縛能和相對應的波函數。接著我們加入雷射的向量位能場，並假設電偶極近似(dipole approximation)，然後與時間相關的薛丁格方程和波函數寫成

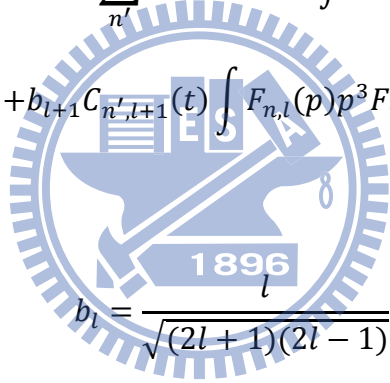
$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = [H_0 + \vec{A}(t) \cdot \vec{p}] \psi(\vec{p}, t) \quad (17)$$

$$\psi(\vec{p}, t) = \sum_{n,l} C_{n,l}(t) F_{n,l}(p) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

其中，電場 $\vec{E}(t) = -\partial \vec{A}(t) / \partial t$ 。這裡我們假定雷射是線性極化場，所以不考慮磁軌道量子數 m ，而 n, l 分別代表主量子數和軌道量子數。我們將波函數代入薛丁格方程做更進一步的化簡

$$i \frac{\partial C_{n,l}(t)}{\partial t} = E_{n,l} C_{n,l}(t) + A(t) \sum_{n'} \{ b_l C_{n',l-1}(t) \int F_{n,l}(p) p^3 F_{n',l-1}(p) dp + b_{l+1} C_{n',l+1}(t) \int F_{n,l}(p) p^3 F_{n',l+1}(p) dp \} \quad (18)$$

其中



$$b_l = \frac{l}{\sqrt{(2l+1)(2l-1)}}$$

我們可以把 $C(t)$ 分成實部和虛部，再利用蛙跳法 stagger leap-frog algorithm 或四階隆巨—庫塔法 4th Order Runge-Kutta Method 等數值方法來對(18)來求解隨時間傳播改變的波函數，但其所花費的時間過長。對於處理這一類的問題的演算法有很多，我們必須尋求一個更有效且快速地解析方法來解決這個非定態薛丁格方程 (non-stationary Schrödinger equation)，在這裡我們採用二階劈裂算符法 (two-order split-operator method) 的數值方法為來計算(17)。

分裂算符法(split-operator method)

我們經由之前的運算可以在動量空間下得到一組的完備的波函數，所以我們將利用這些波函數作為基底展開非定態薛丁格方程式，來求得時間演進的波函數。

考慮在某個時間 t_0 給定一個初始狀態 $|\Psi(t_0)\rangle$ ，經過一段時間後，其狀態變為 $|\Psi(t)\rangle$ ，則我們可以描述此非定態薛丁格方程為

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle$$

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle \quad (19)$$

其中 $U(t, t_0)$ 為時間演進運算子。對上式積分化簡，若 H 為與時間無關，我們可以得到

$$U(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)H} \quad (20)$$

但我們知道 H 與時間有關， $H = H_0 + V$ ，其中

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \int \bar{V}(\vec{p} - \vec{q}) d\vec{q} V = \vec{A}(t) \cdot \vec{p}$$

故 $U(t, t_0)$ 的形式應為

$$U(t, t_0) = \exp \left[-i \int_{t_0}^t dt' H(t') \right]$$

接著我們可以用二階劈裂算符法(two-order split-operator method)，也就是將 $U(t_l + \Delta t, t_l)$ 分解成對稱的形式[12]，如

$$U(t_l + \Delta t, t_l) \simeq e^{-\frac{iH_0 \Delta t}{2}} \times e^{-\frac{iV(t+\frac{\Delta t}{2}) \Delta t}{2}} \times e^{-\frac{iH_0 \Delta t}{2}} \quad (21)$$

其中 $\Psi_{k,l,m,n}$ 為 H_0 的特徵向量，且 $\Psi_{k,l,m,n}(\vec{p}, t) = \langle \vec{p} | \Psi(t) \rangle$ 為完備集合，又

$$\int d\vec{p} |p\rangle\langle p| = 1 \Sigma |\Psi\rangle\langle\Psi| = 1 \quad (22)$$

故將(21)作用在(19)，並適當插入(22)，可得

$$\begin{aligned} & \langle p|\Psi(t)\rangle \\ &= \sum_{k,l,m,n} \iiint_{a,b,c} \langle p|\Psi_k\rangle\langle\Psi_k| e^{\frac{-iH_0\Delta t}{2}} |\Psi_l\rangle\langle\Psi_l| p_c\rangle\langle p_c| e^{\frac{-iV(t+\frac{\Delta t}{2})\Delta t}{2}} |p_b\rangle\langle p_b| \Psi_m\rangle\langle\Psi_m| e^{\frac{-iH_0\Delta t}{2}} |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| p_a\rangle\langle p_a| \Psi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

其中

$$\Sigma_{mn} \langle\Psi_m| e^{\frac{-iH_0\Delta t}{2}} |\Psi_n\rangle = \exp\left(\frac{-iH_{mn}\Delta t}{2}\right) \delta_{mn} H \Psi_n = E_n \Psi_n$$

化簡後可得

$$\sum_{l,n} \iint_{a,b} \Psi_l(p) e^{\frac{-iE_l\Delta t}{2}} \Psi_l^*(p_b) e^{\frac{-iA(t+\frac{\Delta t}{2})p_{bb}\Delta t\cos\theta}{2}} \Psi_n(p_b) e^{\frac{-iE_n\Delta t}{2}} \Psi_n^*(p_a) \Psi(p_a, t_0)$$

我們用勒讓得多項式展開波函數

$$\Psi(p_i, \theta_j, t) = \sum_{l=0}^{l_{max}} g_l(p_i) P_l(\cos\theta_j)$$

其中 $P_l(\cos\theta_j)$ 為規一化勒讓得多項式，我們可以得到 $g_l(r_i)$ 透過高斯-勒讓得積分 (Gauss-Legendre quadrature)

$$g_l(p_i) = \sum_{k=1}^{l+1} w_k P_l(\cos\theta_k) \Psi(p_i, \theta_k, t)$$

$\{\cos\theta_k\}$ 為 P_{l+1} 的 $l+1$ 個零點，而 $\{w_k\}$ 為與零點對應的權重。這裡的規一化相當重要，可以避免中途一些不必要的係數，使得整個傳遞能夠簡單明瞭。當波函數作用到場的部份時，必須將波函數分解成不同角動量的成分再進行作用，因為不同角動量的波函數對於與雷射場的效應不同，根據選擇規則，每個角動量只會與其鄰近正負一角動量

產生交互作用，所以這個部分必須小心謹慎。

當處於雷射場中，電子便會吸收光子的能量產生躍遷，進而發生游離。故當雷射做用完之後，我們必須了解當下電子的狀態，其中我們對於游離態更是興趣濃厚。因為不同角動量子數的波函數彼此正交，故我們利用投影的方式，從一堆疊加態的波函數裏頭分離出束縛態和游離態，找尋我們想知道的資訊，我們有束縛態投影運算子

$$\hat{P}_B = \sum_{all E_\alpha < 0} |\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|$$

和游離態投影運算子

$$\hat{P}_C = \sum_{all E_\alpha \geq 0} |\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha|$$

其中 E_α 和 Ψ_α 分別為沒有微擾的哈密頓運算子的特徵值和特徵函數，很明顯地，

$$\hat{P}_B + \hat{P}_C = I$$

所以對於總波函數 $\Psi(\vec{k}, t_f)$ ，可以分成束縛態 $\Psi_B(\vec{k}, t_f)$ 和游離態 $\Psi_C(\vec{k}, t_f)$ ，其中

$$|\Psi_B(\vec{p}, t_f)\rangle = \hat{P}_B \Psi(\vec{p}, t_f) = \sum_{all E_\alpha < 0} |\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha| \Psi(\vec{p}, t_f)\rangle$$

$$|\Psi_C(\vec{p}, t_f)\rangle = \hat{P}_C \Psi(\vec{p}, t_f) = \sum_{all E_\alpha \geq 0} |\Psi_\alpha\rangle\langle\Psi_\alpha| \Psi(\vec{p}, t_f)\rangle$$

三重微分電離機率(triple differential ionization probability)為光電子在 $\vec{p} = (p, \theta, \phi)$ 能量為 $E = p^2/2m$ 的機率密度

$$\frac{\partial^3 P}{\partial E \partial \Omega} = p |\Psi_C(\vec{p}, t_f)|^2$$

二重微分電離機率(double differential ionization probability) (DDIP)因為整個原子系統是軸對稱，所以與 ϕ 無關

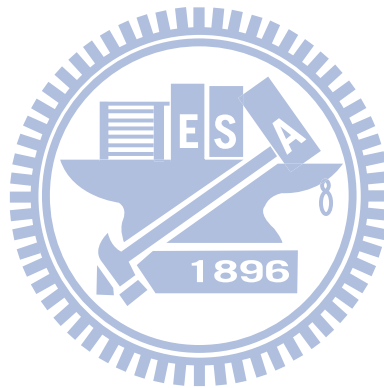
$$\frac{\partial^2 P}{\partial E \sin\theta \partial \theta} = 2\pi \left(\frac{\partial^3 P}{\partial E \partial \Omega} \right)$$

微分電離機率(differential ionization probability) (DIP)可以看到光電子閥上電離(ATI)光譜

$$\frac{\partial P}{\partial E} = \int_0^\pi \left(\frac{\partial^2 P}{\partial E \sin\theta \partial \theta} \right) \sin\theta d\theta$$

總電離機率(total ionization probability)(TIP)

$$P = \int_0^\infty \left(\frac{\partial P}{\partial E} \right) dE$$



第四章 結果

我們用 $p_{max} = 20$ a.u., $L = 2$, 格子數 256 個, $l_{max} = 21$ $R = 150$

特徵值與氫原子能階 $-0.5n^{-2}$ 誤差

表一、ns 能量數值解，解析解和其誤差值

n	ns 數值解	ns 解析解	誤差
1	-0.5	-0.50069	0.000693
2	-0.125	-0.12512	0.000118
3	-0.05556	-0.05559	3.73E-05
4	-0.03125	-0.03127	1.61E-05
5	-0.02	-0.02001	8.33E-06
6	-0.01389	-0.01389	4.85E-06
7	-0.0102	-0.01021	2.80E-06
8	-0.00781	-0.00779	-2.53E-05
9	-0.00617	-0.00577	-0.00041
10	-0.005	-0.0034	-0.0016
11	-0.00413	-0.00063	-0.0035

表二、np 能量數值解，解析解和其誤差值

n	np 數值解	np 解析解	誤差
1	-	-	-
2	-0.125	-0.12501	8.28E-06
3	-0.05556	-0.05556	3.13E-06
4	-0.03125	-0.03125	1.43E-06
5	-0.02	-0.02	7.58E-07
6	-0.01389	-0.01389	4.47E-07
7	-0.0102	-0.0102	1.31E-07
8	-0.00781	-0.00779	-2.50E-05
9	-0.00617	-0.00579	-0.00038
10	-0.005	-0.00345	-0.00155
11	-0.00413	-0.00072	-0.00341

特徵向量與基態 $F_{1s} = \frac{2^{5/2}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(1+p^2)^2}$ 比較

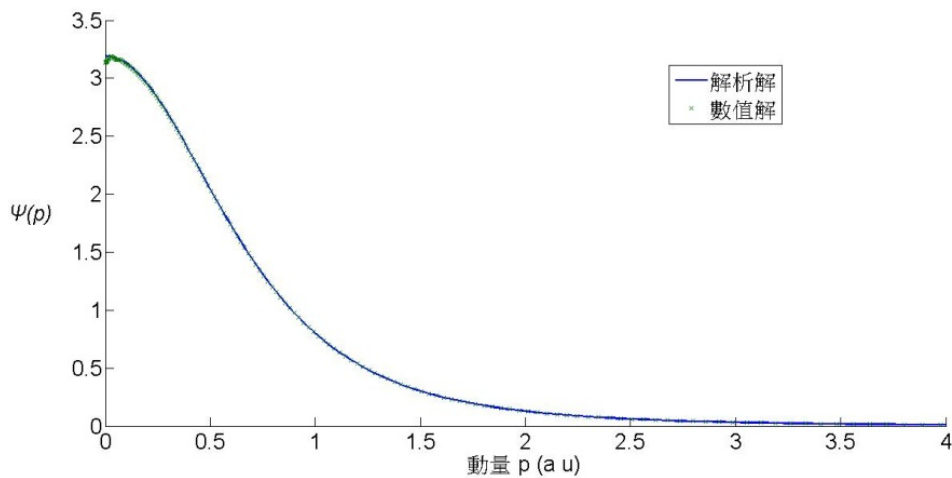


圖 4.1 藍線代表為 1s 波函數在由理論計算後在動量空間下的圖形，星點為用數值方法求得的數值。

我們可以看到解析解和數值解幾乎很貼近，不過實際上仍無法重合，猜想應該若是將漢米爾矩陣用 Lande' subtraction technique 來組成，應該能增加其準確度，使圖形能重合。

震子強度(Oscillator strengths)

為了可以確認我們所得到的波函數是否正確，我們可以計算能態間的躍遷震盪強度。下列式子分別為從能態 (n, l) 躍遷至能態 (n', l') 的震盪強度。在 Bethe and Salpeter 的書上[7]也列舉了一些數值供給校正。

$$f_{n,l \rightarrow n',l+1} = \frac{2(l+1)}{3(2l+1)} \frac{1}{E_{n'} - E_n} \left| \int p^3 F_{n,l}(p) F_{n',l+1}(p) \right|^2$$

$$f_{n,l \rightarrow n',l-1} = \frac{2l}{3(2l+1)} \frac{1}{E_{n'} - E_n} \left| \int p^3 F_{n,l}(p) F_{n',l-1}(p) \right|^2$$

在表三和表四裡，可以看到我們的數值與實際值相符，另外，當我們選擇較多的格點數，或是較大的最大動能值 p_{max} 和距離 R 時，都有助於精確度的提升。

表三、從 $ns \rightarrow np$ 震子強度: Bethe and Salpeter和數值解的誤差

	1s		2s		3s		4s	
	B-S	誤差	B-S	誤差	B-S	誤差	B-S	誤差
2p	0.4162	-7.689[-4]	-		-0.041	-1.319[-4]	-0.009	-2.031[-4]
3p	0.0791	-3.561[-5]	0.4349	-1.777[-3]	-		-0.079	-1.860[-2]
4p	0.029	-1.077[-5]	0.1028	-2.573[-4]	0.484	-1.755[-3]	-	
5p	0.0139	3.993[-5]	0.0419	-3.453[-5]	0.121	-3.542[-4]	0.545	3.941[-3]
6p	0.0078	1.099[-6]	0.0216	2.395[-6]	0.052	-7.306[-4]	0.138	-3.886[-4]
7p	0.0048	1.695[-5]	0.0127	3.110[-5]	0.027	3.208[-4]	0.06	-5.091[-4]
8p	0.0032	1.361[-4]	0.0081	4.604[-4]	0.016	1.292[-3]	0.033	6.598[-4]

表四、從 $np \rightarrow ns$ 震子強度: Bethe and Salpeter和數值解的誤差

	2p		3p		4p	
	B-S	誤差	B-S	誤差	B-S	誤差
1s	-0.139	5.229[-4]	-0.0026	-2.375[-2]	-0.01	3.369[-4]
2s	-		-0.145	6.259[-4]	-0.034	-1.808[-4]
3s	0.014	-2.893[-4]	-		-0.161	2.518[-4]
4s	0.0031	-3.228[-5]	0.032	5.356[-4]	-	
5s	0.0012	2.181[-5]	0.007	4.828[-4]	0.053	3.666[-4]
6s	0.0006	2.220[-5]	0.003	5.315[-5]	0.012	4.252[-4]
7s	0.0003	-1.340[-4]	0.002	-4.101[-4]	0.006	-8.698[-4]
8s	0.0002	4.455[-5]	0.001	-3.855[-6]	0.003	-1.652[-4]

接下來試著加入我們的雷射電場

$$A = \frac{E_0}{\omega} \sin^2\left(\frac{\pi t}{T}\right) \sin(\omega t)$$

Case 1 : $E_0 = 0.3$ $\omega = 0.5$ $T = 10 \text{ cycle} = 126 \text{ au}$

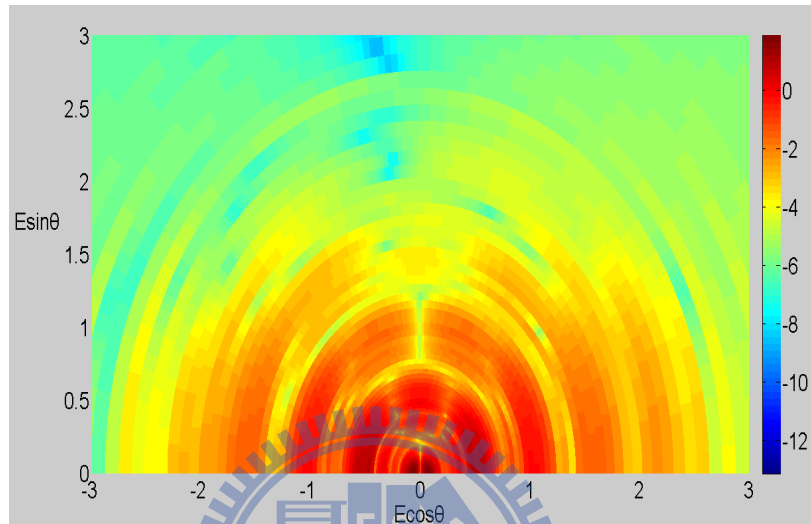


圖 4.2 DDIP : $E_0 = 0.3 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$

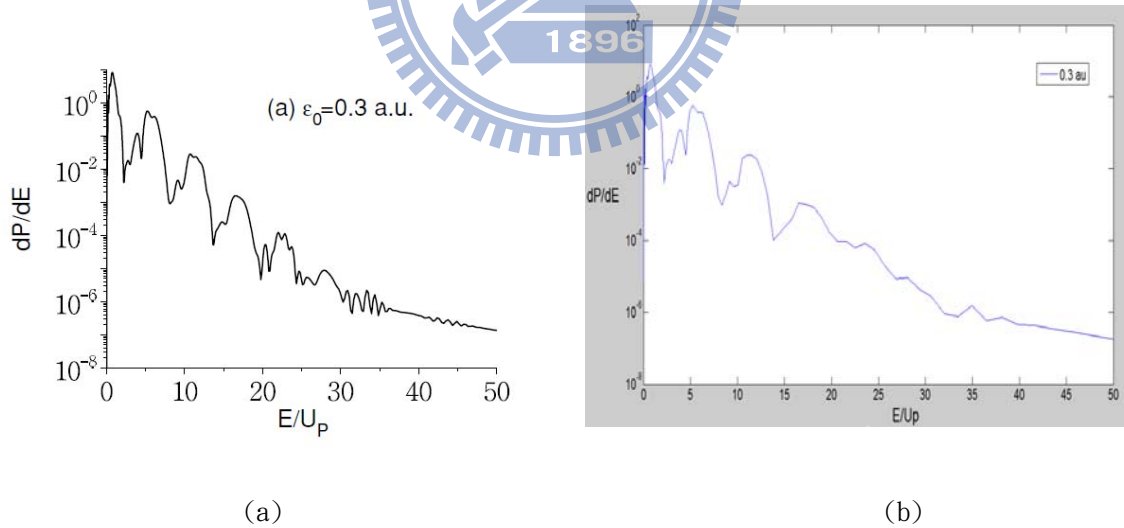


圖 4.3 (a)、Chu 的 DIP 圖形 : $E = 0.3 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$ (b)、數值解的 DIP 圖形 $E = 0.3 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$

圖 4.3(a) 和 (b) 在比例上是差不多的，不過 (a) 取的格點數較多，所以能把後面能量較高的形狀表現出來。

Case 2 : $E_0 = 0.5$ $\omega = 0.5$ $T = 10 \text{ cycle} = 126 \text{ au}$

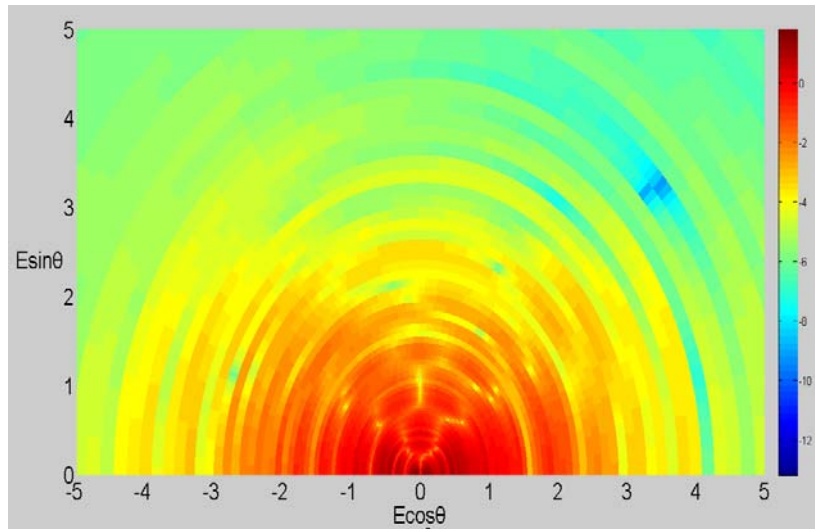
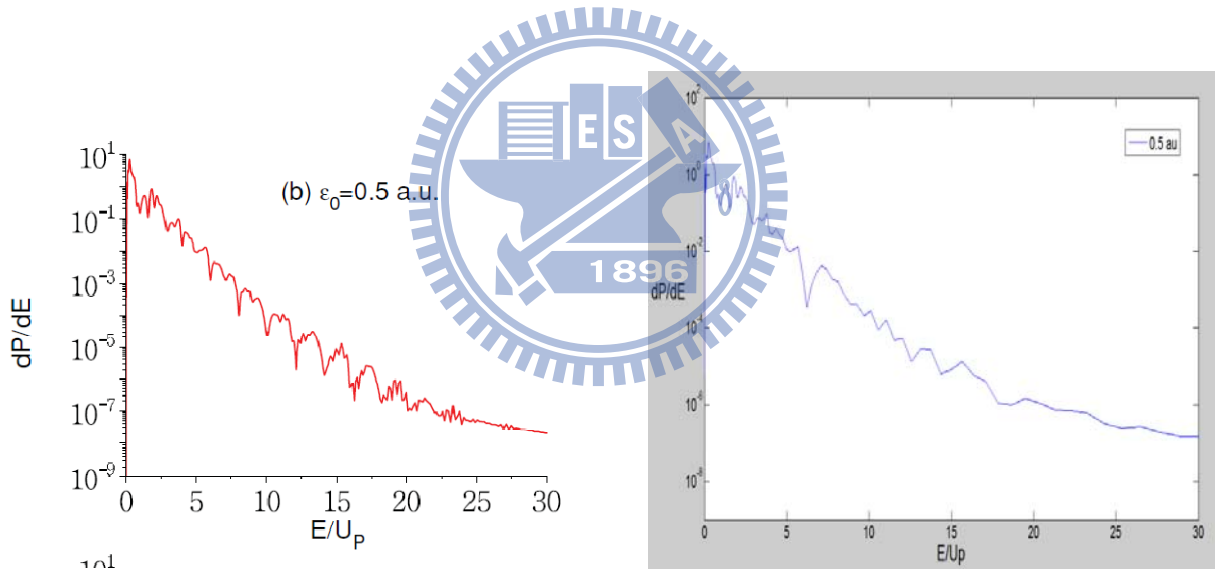


圖4.4 DDIP : $E_0 = 0.5 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$



(a)(b)

圖4.5 (a)、Chu的DIP圖形 : $E = 0.5 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$ (b)、數值解的DIP圖形 : $E = 0.5 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$

圖4.5(b)的趨勢和圖4.5(a)幾乎差不多，在數量級上也可以接受，不過無法如圖4.5(a)能清楚表現其ATI圖形。

Case 3 : $E_0 = 1$ $\omega = 0.5$ $T = 10 \text{ cycle} = 126 \text{ au}$

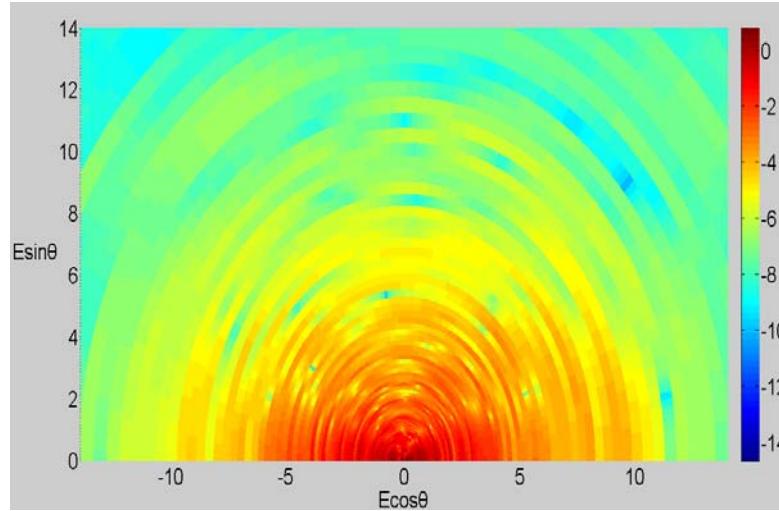


圖4.6 DDIP : $E_0 = 1 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$

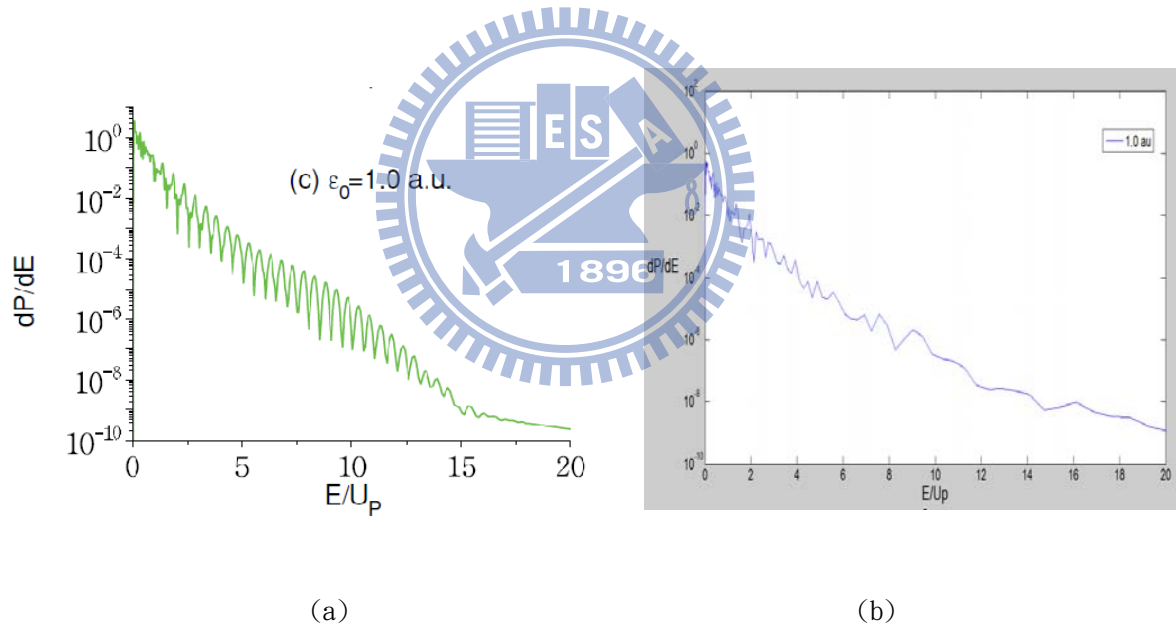
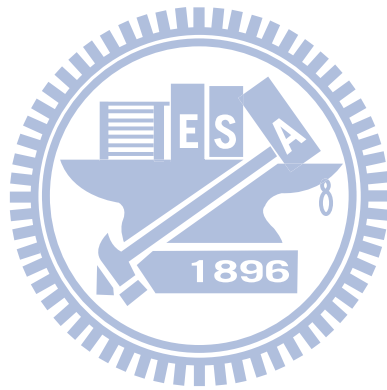


圖4.7 (a)、Chu的DIP圖形 : $E = 1 \text{ au}$, $\omega = 0.5 \text{ au}$ (b)、數值解的DIP圖形 : $E = 1 \text{ au}$
 $\omega = 0.5 \text{ au}$

圖4.7(b)的趨勢和圖4.7(a)差了更多，不過在數量及尚在數量級勉強也可以接受，若能增加格點數，相信圖4.7(b)會與圖4.7(a)接近

第五章 結論

在我的計算裡，由初始態和震子強度的數值都和解析解相差不大，所以是值得信任的。接下來在跑ATI的圖時，當電場大小為 $0.3a_u$ ，前面幾個特徵的ATI都有出現，不過能量越大越看不清楚；當電場大小提高時，雖然數量級差不多，可是ATI卻幾乎看不到了，不過從二重微分電離機率圖可以看出，當電場增加時，環數越來越多，也就是說明ATI的峰越來越多。為了可以清楚得到ATI的圖形，必須增加格子點數才行。在這裡，只有切256個格子點，所以才會造成許多現象無法出現。



參考資料

1. N. B. Delone and V. P. Krainov: *Multiphoton Processes in Atoms*, (Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1994).
2. Paul Gibbon : *Short Pulse Laser Interactions with Matter*, (Imperial College Press 2005).
3. P. Agostini, F. Fabre, G. Mainfray, and G. Petite : *Free-Free Transitions Following Six-Photon Ionization of Xenon Atoms*, Phys. Rev. Lett. 42 1127 (1979).
4. P. Kruit, J. Kimman and M. Van der Wiel, J. Phys. B. 14, (1981), L507.
5. Yongfeng Ni : *From Strong Field Ionization to the Generation of Attosecond Laser Pulses*, (PrintPartners Ipskamp B. V., the Netherlands 2006).
6. B.H. Bransden & C.J. Joachain : *Physics of Atoms and Molecules*, (Benjamin Cummings 2003).
7. Bethe and Salpeter : *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms* (Springer , 1977).
8. T.F. Jiang, *Calculation of atomic hydrogen and its photoelectron spectrum in momentum space*, Computer Physics Communications 178 (2008) 571–577.
9. Zhongyuan Zhou and Shih-I Chu, *Precision calculation of above-threshold multiphoton ionization in intense short-wavelength laser fields: The momentum-space approach and time-dependent generalized pseudospectral method*, PRA **83**, 013405 (2011).
10. N. B. Delone and M. V. Fedorov : *Above Threshold Ionization*, Progress in Quantum Electronics, Volume 13 Number 1 1989.
11. M. V. Fedorov and A. E. Kazakov : *Resonances and saturation in multiphoton bound-free transitions*, Progress in Quantum Electronics, Volume 13 Number 4 1989.

12. X. M. Tong and S. I. Chu, Chem. Phys. 217, 119 (1997).



附錄 A 動力勢能

電磁波會造成電子來回加速的運動，在強雷射場下，這種震盪運動具有一定的影響。首先考慮一個會隨空間位置改變的電場，它的形式為

$$E(\vec{r}, t) = E_0(\vec{r})\cos(\omega t).$$

電場振幅可以用泰勒展開近似成

$$E_0(\vec{r}) = E_0(\vec{r}_0) + (\delta\vec{r}(t) \cdot \nabla)E_0|_{\vec{r}=\vec{r}_0} + \dots$$

其中 $\delta\vec{r}(t)$ 為電子在電場下的平移

$$\delta\vec{r}(t) = -\frac{eE_0}{m_e\omega^2}\cos\omega t \quad (1)$$

當然，電子的速度可以得到

$$v(t) = \frac{eE_0}{m_e\omega^2}\sin\omega t \quad (2)$$

因此，電子的運動方程式可寫成

$$\begin{aligned} m_e \frac{dv}{dt} &= e(E + v \times B) \\ &= e[E_0 \cos\omega t + (\delta\vec{r}(t) \cdot \nabla)E_0 \cos\omega t - \frac{1}{\omega} v \times (\nabla \times E_0 \sin\omega t)] \end{aligned} \quad (3)$$

將(1)(2)式代入(3)式中，且以平均週期計算可得

$$m_e \left\langle \frac{dv}{dt} \right\rangle = -\frac{e^2}{2m_e\omega^2} [(E_0 \cdot \nabla)E_0 - E_0 \times (\nabla \times E_0)] = -\frac{e^2}{4m_e\omega^2} \nabla |E_0(\vec{r}_0)|^2$$

此作用力為動力勢能的梯度，故動力勢能為

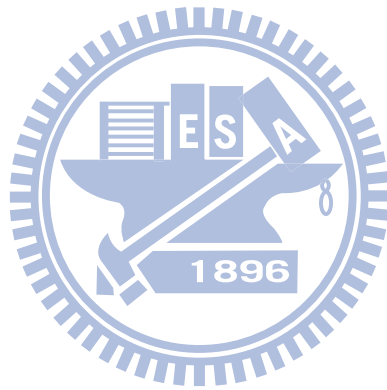
$$U_p = \frac{e^2}{4m_e\omega^2} |E_0|^2$$

電場強度為

$$I = \varepsilon_0 c \langle |E(\vec{r}, t)|^2 \rangle = \varepsilon_0 c \frac{|E_0|^2}{2}$$

故動力勢能可改寫成

$$U_p = \frac{e^2 I}{2m_e \varepsilon_0 c \omega^2}$$



附錄 B $\phi(\vec{p})$ 規一化

如果 $\psi(\vec{r})$ 是規一化函數，那麼

$$\int |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} = 1 \quad (\text{B.1})$$

我們已經得知 $\phi(\vec{p})$ 傅立葉轉化的形式

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int \exp(i\vec{p} \cdot \vec{r}) \phi(\vec{p}) d\vec{p} \quad (\text{B.2})$$

將 (B.2) 代入 (B.1)，則

$$\int d\vec{r} \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r} \int d\vec{p} \int d\vec{p}' \exp[i(\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{r}] \phi^*(\vec{p}') \phi(\vec{p}) = 1$$

因為

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r} \exp[i(\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{r}] = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

我們可以知道

$$\int d\vec{p} \int d\vec{p}' \delta(\vec{p} - \vec{p}') \phi^*(\vec{p}') \phi(\vec{p}) = 1$$

所以

$$\int |\phi(\vec{p})|^2 d\vec{p} = 1$$

故 $\phi(\vec{p})$ 亦可以寫成

$$\phi(\vec{p}) = F_{n,l}(p) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$