

LABORATOIRE DE SIMULATION DE BIOPHYSIQUE **MOLECULAIRE**

LABORATORY OF SIMULATION AND MOLECULAR BIOPHYSICS

ETUDE THEORIQUE DE L'IONISATION DE L'ATOME D'HYDROGENE EN CHAMP LASER INTENSE : UNE APPROCHE QUASI-**ANALYTIQUE DANS L'ESPACE DES MOMENTS**

Mémoire présenté et soutenu en vue de l'obtention du Diplôme de Professeur de l'Enseignement Secondaire Deuxième

grade (DI.P.E.S.II)

Par:

SAHA Etienne Dieudonné

Matricule : CM04-10SCI 2084

Licencié en physique

Sous la direction de :

Sous la supervision de :

H.M. TETCHOU **NGANSO**

Luc.C OWONO OWONO

Professeur

Université de Douala

Chargé de cours

Université de Yaoundé I

Année académique : 2015 – 2016

ETUDE THEORIQUE DE L'IONISATION DE L'ATOME D'HYDROGENE EN CHAMP LASER INTENSE :APPROCHE QUASI-ANALYTIQUE DANS L'ESPACE DES MOMENTS

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de professeur de l'enseignement secondaire général deuxième grade : **D.I.P.E.S II**

par

SAHA Etienne Dieudonne

Matricule CM04-10SCI2084

Licencié en Physique

sous la direction de :

H.M TETCHOU NGANSO

Chargé de cours

Université de Douala

sous la supervision de :

L.C OWONO OWONO

professeur

Universite de yaoundé I

Année Académique 2015-2016

Table des matières

Liste des abréviations			ii	
D	édica	ce	iii	
R	emer	ciements	iv	
R	ésum	é	vi	
A	bstr	act	vii	
In	trod	uction générale	1	
1	1 MECANISME D'IONISATION DE L'HYDROGENE ATOMIQUE			
	\mathbf{EN}	CHAMP LASER INTENSE	4	
	1.1	Introduction	4	
	1.2	Brève description du champ laser	4	
		1.2.1 Classification des champs lasers	4	
		1.2.2 Description du champ Laser	6	
	1.3	Quelques notions importantes : le déplacement Stark et le potentiel pondéromoteur	9	
		1.3.1 Le déplacement Stark	9	
		1.3.2 Le potentiel pondéromoteur	11	
	1.4	Le paramètre de Keldysh	12	
	1.5	Mécanismes d'ionisation dans les atomes	14	
		1.5.1 Ionisation multiphonique	14	
		1.5.2 Ionisation au dessus du seuil	15	

		1.5.3	Ionisation tunnel	18
	1.6	Conclu	sion \ldots	19
2	\mathbf{ET}	UDE	THEORIQUE DE L'IONISATION DE L'ATOME D'HY	-
	NE : APPROCHE QUASI-ANALYTIQUE DANS L'ES	-		
	PACE DES MOMENTS			
	2.1	Introdu	action	21
	2.2	Struct	ure atomique de l'atome d'hydrogène	21
		2.2.1	Fonction d'onde	21
		2.2.2	Spectre d'énergie	23
2.3 Hamiltonien atome-champ				24
	2.4	Théor	ème d'Ehrenfest	27
	2.5	Equat	ion de Schrödinger dans l'espace des moments : cas du Potentiel séparable .	28
		2.5.1	Formulation du problème	28
		2.5.2	Construction des potentiels séparables	29
		2.5.3	Mise en équation matricielle	31
		2.5.4	Application au cas du potentiel $(1s+2s+2p)$	33
		2.5.5	Calcul des observables physiques	35
	2.6	Concl	usion	37
3	RE	SULT	ATS NUMERIQUES ET DISCUSSIONS	38
	3.1	Introdu	uction	38
	3.2	Densit	é de probabilité en fonction du temps et de la composante P_Z Pour une	
		intensi	té $I = 3 \times 10^{14} W.cm^{-2}$,	39
	3.3	Densit	té de probabilité d'ionisation en fonction de P_Z	44
	3.4	Popul	ation des états discrets : oscillations de Rabi	48
	3.5	Concl	usion	49
4	IM	PLIC	ATION DU SUJET SUR LE SYSTEME EDUCATIF	50
	4.1	Introd	luction	50
	4.2	Fiche	pédagogique	50

4.3	Intérê	t didactique	53	
	4.3.1	Physique chimie	53	
	4.3.2	Technologie	53	
Conclusion générale et perspectives				
Bibliographie				

Liste des tableaux

Table des figures

1.1	Variation temporelle du potentiel vecteur en fonction de la phase $\phi = 0, \ \phi = \frac{\pi}{2}$ et	
	π Les caractéristiques du champ sont données sur le graphe [4]	7
1.2	Variation temporelle du champ électrique en fonction de la phase $\phi = 0, \ \phi = \frac{\pi}{2},$	
	$\phi = \pi$. Les caractéristiques du champ sont données sur le graphe [4]	8
1.3	Décalage Stark sur les différents niveaux d'énergie. Le potentiel d'ionisation ${\cal I}_P$	
	augmente d'un terme correspondant au potentiel pondéromoteur U_P	11
1.4	Ionisation multiphotonique. L'électron absorbe simultanément n photons pour quit-	
	ter l'état fondamental et se retrouver dans le continuum [4]	15
1.5	Description schématique du processus d'ionisation au dessus du seuil [5]. L'électron	
	bien qu'ayant franchit le potentiel d'ionisation Ip continu à absorber des photons.	16
1.6	Spectre ATI calculé par l'ESDT du potentiel séparable dans l'espace des moments.	
	Les paramètres lasers sont donnés en bas du graphe [4]. Les lignes verticales en	
	pointillées marquent la position des coupures respectivement à 2Up (marron), et	
	10Up (vert)	17
1.7	Deux régimes d'ionisations a) effet tunnel et b) suppression de la barrière [6]	19
2.1	Spectre d'énergie de l'atome d'hydrogène et notation spectroscopique	24
3.1	Densité de probabilité en fonction du temps et de Pz , $P_n = 0$ obtenue en utilisant	
	le potentiel de coulomb exact $[3]$	41
3.2	Densité de probabilité en fonction du temps et de Pz , $P_n=0$. Le potentiel séparable	
	ne supporte que l'état $(1s)$	42

3.3	Densité de probabilité en fonction du temps et de $Pz\;,\!P_n=\!0$. Le potentiel séparable	
	supporte l'état $(1s + 2s)$	42
3.4	Densité de probabilité en fonction du temps et de $Pz\;,\!P_n=\!0$. Le potentiel séparable	
	supporte l'état $(1s + 2s + 2p)$	43
3.5	Densité de probabilité d'ionisation $ \Phi(P_n = 0, Pz, t) ^2$ en fonction de Pz obtenue	
	à la fin de l'interaction en utilisant le potentiel exact obtenu de la résolution de	
	l'ESDT	44
3.6	Densité de probabilité d'ionisation $ \Phi(P_n = 0, Pz, t) ^2$ en fonction de Pz obtenue à	
	la fin de l'interaction en utilisant le potentiel supportant l'état $(1s)$.Les caractéris-	
	tiques de l'impulsion laser sont sur la figure	45
3.7	Densité de probabilité d'ionisation $ \Phi(P_n = 0, Pz, t) ^2$ en fonction de Pz obtenue	
	à la fin de l'interaction en utilisant le potentiel supportant l'état $(1s + 2s)$.Les	
	caractéristiques de l'impulsion laser sont sur la figure	45
3.8	Densité de probabilité d'ionisation $ \Phi(P_n = 0, Pz, t) ^2$ en fonction de Pz obtenue à	
	la fin de l'interaction en utilisant le potentiel support ant l'état $\left(1s+2s+2p\right)$. Les	
	caractéristiques de l'impulsion laser sont sur la figure.	46
3.9	Population de l'état lié pour une impulsion laser de 30 Cycle optique avec une	
	intensité $I=5 \times 10^{13} w/cm^{-2}$ à la fréquence de résonance $W=0,375u.a.$	48

Liste des abréviations

Dédicace

Je dédie ce mémoire à :

 Toute ma famille qui a accepté des peines et des privations énormes pour m'apporter tout son soutien au cours de ces deux années de formation.

Remerciements

Ce travail est le fruit des efforts intenses que ma modeste personne ne peut prétendre avoir fourni seule. Qu'il me soit permis d'exprimer toute ma gratitude :

-À L'Éternel, Dieu vivant, Qui nous guide et nous instruit chaque jour.

À mon Directeur Dr . H. M . TETCHOU NGANSO pour son attention, sa disponibilité , sa compréhension , et surtout son amour pour le travail..

 Au Pr L.C. OWONO OWONO codirecteur de ce travail , pour les multiples efforts qu'il a fournis pour la réussite de cette année académique .

– Au Centre de Physique Atomique Moleculaire et Optique Quantique (CE-PAMOQ)de l'Université de Douala qui, à travers le Dr H .M. TETCHOU NGANSO nous a bien accueilli dans le cadre de nos travaux . Nous avons pu apprécier la dynamique des enseignants, la convivialité entre les membres du staff et le cadre de travail qu'offre cette structure . de manière directe ou indirecte contribué a rendre ce travail effectif .

-À tous les enseignants du Département de Physique de l'École Normale Supérieure, qui n'ont ménagé aucun effort pour nous dispenser des enseignements de qualité.

 $-\dot{\rm A}$ tous mes camarades de promotion pour la solidarité et la chaleur qui nous réunies .

 À toute ma famille, pour les encouragements, l'affection, et le soutien multiforme.

- À ma chère M .TCHINDA pour son soutien, ses encouragements, son affection

à la réalisation de ce mémoire.

Résumé

Dans ce travail portant sur l'étude théorique de l'ionisation de l'atome d'hydrogène en champ laser intense par une approche quasi-analytique dans l'espace des moments, il a été question pour nous de résoudre l'équation de Schrödinger dans l'espace des moments en faisant usage d'un potentiel model. Cette méthode introduite par H.M.Tetchou Nganso est une technique des potentiels séparables permettant de résoudre d'une façon quasi-analytique cette équation. Tout d'abord, nous avons procédé à une description du champ laser. Ensuite, nous avons décrit les différents processus susceptibles de se produire lorsqu'un système atomique est en interaction avec un champ laser intense. Nous avons rappelé sommairement la résolution de l'équation de schrödinger dans l'espace des positions sous les jauges de longueur et de vitesse. Aprés ce qui précéde, nous avons procédé à la décomposition du noyau de cette équation sur les états propres du potentiel en utilisant la technique introduite par H.M. Tetchou Nganso. Cette approche a le bon goût de réduire l'équation initiale à un sytème linéaire d'équations couplé de type Voltera de second espèce dont les méthodes de résolution sont abondantes dans la littérature. De cette théorie, nous sommes passés à la phase d'application qui a consisté à un traitement numérique précis du système linéaire d'équations couplé de Voltéra de seconde espéce. Les observables physiques telles que la densité de probabilité, la densité de probabilité d'ionisation, et la population des états discrets sont analysées succinctement au dernier chapitre de ce travail. Finalement nous dégageons une conclusion générale et les perspectives de notre travail.

Abstract

The aim of this work is the theorical study of the ionization of hydrogen atom by quasi-analytic approach in momentum space. The isue was to solve the Schrödinger equation in momentum space by using a potentiel model. This potentiel model which had been introduced by H.M. Tetchou Nganso is a methods of separable potential that permit us to solve this equation. Firstly, we have described the laser field, and then have described the different process which can occur when an atomic system is exposed to a strong laser field. We have made the presentation of Schrödinger equation (TDSE) in the configuration space and then the (TDSE) in the momentum space using the new model of separable potential by mean of the fourier transformation. Lat on, we have made the decomposition of the kernel of the Schrödinger equation over the discret states of coulombian potential. Thus the initial equation is transform to a system of N coupled of Voltera integral equation of second type that we have solved by mathématical méthods. finally, we deal with the numerical implémentation of this system of equation. Appropriate physical observable have been analysed such has probability density, ionisation density of probability and bound state populations.

Introduction Générale

A l'heure actuelle, des lasers pulsés émettant dans l'infrarouge proche comme le Laser Saphir dopé Titane(Ti :Saphir) $\lambda = 800nm$, sont disponibles à l'échelle du Laboratoire. Ils délivrent sur une échelle de temps de l'ordre d'une vingtaine de femtosecondes (1 femtoseconde = $10^{-15}s$), des énergies de l'ordre du millijoule, donnant accès à des puissances Laser de l'ordre de quelques gigawatts. Avec de telles intensités, on ne peut plus considérer que l'atome subit une simple pertubation du champ électromagnétique du laser. C'est dans ce contexte des impulsions brèves, intenses et basses fréquence que nous plaçons notre étude théorique de l'interaction d'un atome d'hydrogène avec un champ Laser. Ceci ouvre de nouveaux champs d'investigations aussi bien du côté expérimental et théorique que du côté numérique. Il est donc en particulier très nécessaire de développer des méthodes théoriques et numériques adaptées aux contextes de ces champs lasers. D'un autre côté, l'essor et l'emploi de ces types de lasers ont conduit à l'observation des processus non linéaires au niveau de l'atome. Il sagit de la génération d'harmoniques d'ordre élevé et l'ionisation au dessus du seuil. Un grand nombre de théorie a vu le jour pour tenter de décrire la dynamique d'ionisation d'un système atomique interagissant avec des impulsions lasers intenses et brèves. Nous pouvons mentionner ici la strong Field Approximation (SFA) dite approximation du champ fort basée essentiellement sur le couplage entre l'état fondamental non perturbé et les états du continuum.

La SFA s'appuie sur l'hypothèse que le champ est suffisamment fort pour abaisser la barrière de potentiel et laisser l'électron s'échapper directement dans le continuim. De ce fait, aucun autre état discret de l'atome que le niveau fondamental 1s ne contribue au processus d'ionisation. L'ionisation de l'atome dans le régime tunnel fut étudiée par Keldysh et a été améliorée avec la théorie Keldysh-Faisal-Reiss (K F R) [1]. Ces methodes n'ont pas donné des résultats satisfaisants pour tout domaine d'ionisation. Les méthodes D'Ammosov-Delone-Krainov (ADV) [2] et leurs limites ont été discutées et proposées dans la littérature. Certes toutes ces théories ont conduit à une compréhension plus approfondie des proccéssus physiques impliqués dans l'interaction laser-matière, mais elles se sont révélées moins satisfaisantes que celles basées sur la résolution de l'équation de schrödinger dépendant du temps (ESDT). Dans ce registre, l'approche qui attire notre attention est celle développée par Armel de Bohan pour résoudre l'ESDT dans l'espace des moments. Ses travaux sont motivés par le fait que qu'il ya une inadéquation entre le taux d'ionisation moyen calculé par les méthodes numériques de l'ESDT et celui trouvé par les méthodes de la SFA et ses dérivées. A l'issue de ses travaux sur la dynamique de l'ionisation de l'atome d'hydrogène, Armel de Bohan [3] arrive à deux conclusions :

- l'espace des moments est un espace privilégié pour la compréhension de ce proccéssus physique,
- le potentiel coulombien et donc la structure de l'atome joue un rôle fondamental sur le mécanisme d'éjection de l'électron dans le continuum.

Les travaux de H .M . Tetchou Nganso [4] s'inscrivent dans la suite logique de ceux de Armel de Bohan sur la question de l'influence du potentiel Coulombien dans le mécanisme d'ionisation. Contrairement à Armel de Bohan, l'auteur propose une méthode quasi-analytique pour la résolution de l'ESDT sous sa forme jauge vitesse directement dans l'éspace des moments. La singularité du potentiel Coulombien dans cet espace rend la résolution de l'ESDT complexe. Pour contourner cette difficulté, Tetchou Nganso a introduit le modèle du potentien séparable . Ce modèle consiste à remplacer le noyau non local par une somme finie de N potentiels séparables où chacun supporte un état lié de l'atome d'hydrogène. Cette approximation a donc permis de ramener l'ESDT tridimensionnelle à un système linéaire d'équations couplé de Voltera de 2^{nde} espèce .

Dans le cadre de notre étude, il s'agira précisément d'étudier l'importance du potentiel Coulombien dans la dynamique d'ionisation de l'atome d'hydrogène. Pour mener à bien notre travail, nous l'avons organisé ainsi qu'il suit : Au prémier chapitre, nous exposons brièvement quelques processus non linéaires susceptibles de se manifester lors de l'interaction atome-champ laser intense. Dans le second chapitre nous formulons la dynamique de l'ionisation de l'atome d'hydrogène par une approche quasi-analytique de l'ESDT dans l'espace des moments . Nous en dégageons les observables physiques telles que les densités de probabilités et les populations des états liés. le troisièeme chapitre est dédié aux résultats numériques et leurs analyses . Dans un quatriéme chapitre nous donnons l'implication pédagogique de notre travail et dans une conclusion générale, nous annonçons les pérpectives.

MECANISME D'IONISATION DE L'HYDROGENE ATOMIQUE EN CHAMP LASER INTENSE

1.1 Introduction

La compréhension des mécanismes d'ionisations de l'hydrogène atomique en champ laser intense nécessite la description de certain types de processus qui interviennent lors de l'interaction, rendant possible l'exploration de l'atome. L'interaction entre un sytème atomique et un champ laser intense a conduit à la découverte des divers processus dont la compréhension servira à l'interprétation des résultats numériques présentés dans la suite de ce travail. Il existe cependant de nombreux processus atomiques susceptibles de se manifester lors de cette interaction . Dans ce chapitre nous présenterons uniquement les processus utiles qui nous concernent dans le cadre de notre travail.

1.2 Brève description du champ laser

1.2.1 Classification des champs lasers

L'utilisation du rayonnement laser est très fréquente dans l'étude du mécanisme d'ionisation des atomes à cause de ses caractéristiques : monochromaticité, cohérence, polarisation, son intensité et sa durée d'impulsion. Dans le cadre de notre étude, nous faisons usage des impulsions brèves et intenses . Pour tout champ électromagnétique, le rayonnement émis est pris à partir d'une valeur de référence définie par les Physiciens du domaine atomique. Cette valeur notée I_0 est définie comme étant l'intensité d'un rayonnement dont le champ électrique est celui que subit l'électron d'un atome d'hydrogène sur la première orbite de Bohr.

De ce fait les impulsions lasers peuvent être classées en fonction du rapport $\frac{I}{I_0}$ de l'intensité crête de l'impulsion I par rapport à l'intensité de référence I_0 [5]

- Lorsque $\frac{I}{I_0} \ll 1$, le champ est dit peu intense ou faible,
- Lorsque $\frac{I}{I0} \simeq 1$ le champ est dit intense ou fort,
- Lorsque $\frac{I}{I0} \gg 1$, le champ est dit très intense.

L'intensite I_0 a pour expression

$$I_0 = \frac{1}{2}\varepsilon CE^2 \tag{1.1}$$

avec E le champ électrique que ressent l'électron sur la première orbite de bohr, et où C=2,997924m/s est la vitesse de la lumière et ε la permittivité dans le vide. Il est important de noter que la notion d'impulsion brève renvoie à la durée τ de l'interaction qui est reliée à une durée de référence τ_0 réprésentant la période durant laquelle un électron parcourt cette orbite de Bohr; $\tau_0=152$ attosecondes $(1as=10^{-18}s)$. Le rapport $\frac{\tau}{\tau_0}$ permet de caractériser l'impulsion laser :

- Lorsque $\frac{\tau}{\tau_0}$ est de l'ordre du nanoseconde $(1ns=10^{-9}s)$ alors l'impulsion est dite très longue.
- Lorsque $\frac{\tau}{\tau_0}$ est de l'ordre du picoseconde $(1ps=10^{-12}s)$ alors l'impulsion est dite longue.
- Lorsque $\frac{\tau}{\tau_0}$ est de l'ordre de l'attoseconde $(1as=18^{-18}s)$ alors l'impulsion est

dite ultra brève .

En fonction de la valeur de la fréquence, on peut distinguer deux régimes d'ionisation : le régime bas fréquence et le régime haut fréquence :

- – Le régime haut fréquence est celui pour le
quel les fréquences w prises en considération sont telles que
 $\hbar w \gg I_p$
 - -Le régime bas fréquence est celui pour le quel les fréquences w prises en considération sont telles que $\hbar w \ll I_p$

où I_P est defini comme le potentiel d'ionisation de l'atome.

1.2.2 Description du champ Laser

La modélisation du champ laser est très difficile car le rayonnement considéré est de l'ordre du femtoseconde. Ce rayonnement nécessite la prise en compte de la variation temporelle de l'enveloppe du champ. De ce fait deux théories descriptives d'une impulsion peuvent être prises en compte. Une qui privilégie le champ électrique d'une impulsion laser et l'autre son potentiel vecteur. Par conséquent, l'enveloppe de l'impulsion laser peut être associée à son potentiel vecteur ou a son vecteur champ électrique. Le champ électrique commode à l'intégration numérique est un champ sinus carré polarisé de façon rectiligne suivant l'axe Oz. Ce champ incident est donné par :

$$E(t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial A(t)}{\partial t}.$$
(1.2)

L'expression du potentiel vecteur le plus souvent utilisé est donnée par :

$$\mathbf{A(t)} = A_0 \sin^2(\frac{\pi t}{T_P}) \sin(wt + \phi) e_Z = A(t) e_Z \quad si \qquad 0 < t < T_P$$
(1.3)

$$A(t)=0$$
 si non

$$avec \qquad A_0 = \frac{c}{w} \sqrt{\frac{I}{I_0}} \tag{1.4}$$

$$E(t) = \frac{c}{w} \sqrt{\frac{I}{I'_0}} [1 - \cos^8(\frac{\pi t}{T_P})] sin(wt + \phi) e_Z si \quad 0 < t < T_p$$

$$E(t) = 0 \quad \text{si non}$$

$$(1.5)$$

où

 $T = \frac{2\pi}{w}$ est la période du champ laser; w l'énérgie du photon(u a) ou pulsation; $T_P = n_c T$ est la durée de l'interaction et n_c le nombre de cycle optique

La figure (1.1) ci-dessous montre la variation temporelle de ce potentiel vecteur pour quelques valeurs de la phase ϕ



FIGURE 1.1 – Variation temporelle du potentiel vecteur en fonction de la phase $\phi = 0$, $\phi = \frac{\pi}{2}$ et π Les caractéristiques du champ sont données sur le graphe [4].

7



FIGURE 1.2 – Variation temporelle du champ électrique en fonction de la phase $\phi = 0, \ \phi = \frac{\pi}{2}, \phi = \pi$. Les caractéristiques du champ sont données sur le graphe [4]

Pour terminer cette description du champ, définissons deux valeurs importantes d'intensité pour l'étude du mécanisme d'ionisation il s'agit de :

L'intensite de saturation I_{sat}

Elle se définit comme la valeur de l'intensité pour laquelle l'ionisation est complète à moins d'une période laser. Cette intensité est de $I_{sat} = 7,9.10^{14}Wcm - 2$ pour l'atome d'hydrogene [7]. IL est cependant important de rappeler qu'au delà de cette intensité, aucune ionisation n'est possible car le système est supposé être totalement ionisé.

L'intensité critique I_{crit}

Il représente l'intensité à partir de laquelle l'ionisation au dessus de la barrière est atteinte .Sa valeur est $I_{crit} = 5.10^{14} W cm^{-2}$ pour l'atome d'hydrogène. Au delà de cette intensité l'ionisation est significative car l'électron plane au dessus de la barrière de potentiel effectif

1.3 Quelques notions importantes : le déplacement Stark et le potentiel pondéromoteur

1.3.1 Le déplacement Stark

Les intensités utilisées dans notre travail sont inferieures à la valeur $I = 10^{18} W cm^{-2}$, pour laquelle les effets relativistes se manifestent. L'utilisation des intensités laser de plus en plus grandes générées par le développement récent des techniques lasers ne reste pas sans conséquence sur la structure du spectre d'énergie de l'atome : on observe par exemple le déplacement des niveaux d'énergies atomiques en présence d'un champ externe. Cette réponse des niveaux d'énergies matérialisée expérimentalement par la diminution (voire la disparition) des premiers pics du spectre d'énergie, trouve son explication dans l'effet Stark dynamique. Ce dernier se définit comme la modification de l'énergie d'un électron lorsque celui-ci est placé dans un champ électrique. Son expression peut être déterminée par un calcul perturbatif, en considérant le hamiltonien Stark $H_s=-q\xi r$ = $e\xi z$ comme un terme perturbatif du hamiltonien atomique $H_0.\xi$ est le champ électrique, r la position de l'électron et $q = -e = -1,60219.10^{-19}C$ sa charge. Dans le cas du champ électrique statique ε , [6] la modification au premier ordre de l'énergie $\Delta E_i = \xi e \langle 1|Z|1 \rangle$ est nulle car l'état fondamental $|1s\rangle$ est à symétrie sphérique. Pour voir donc le déplacement Stark, il faut passer aux ordres supérieurs où la variation ΔE_i du niveau d'énergie i est donnée par :

$$\Delta E_i = \frac{e^2 \xi_0^2}{4mw^2} \left[1 - \sum_{i \neq j} \bar{f}_{f_i} \frac{w_{f_i}^2}{w_{f_i}^2 - w^2}\right] \tag{1.6}$$

Où $m = 9,10953.10^{-31} kg$ est la masse de l'électron, \bar{f}_{f_i} est la force de l'oscilla-

teur, ξ_0 est l'amplitude du champ électrique et w_{f_i} la différence entre la fréquence de l'état final et celle de l'état initial. Dans le cas $w_{f_i} \ll w$ correspondant aux états faiblement liés ou états de Rydberg (près du continuum) et les états du continuum, le rapport de la sommation dans le deuxième terme de la partie de droite de l'équation (1.7) tend vers zéro. Autrement dit, la variation d'énergie ΔE_i se réduit à un déplacement global des niveaux d'énergies

$$\Delta E_i = \frac{e^2 \xi_0^2}{4mw^2} \tag{1.7}$$

appelée communément énergie ou potentiel pondéromoteur U_P (voir sous-section suivante). Par contre pour les fréquences $w_{f_i} \gg w$ correspondant à des états fortement liés (exemple : l'état ($|1s\rangle$) ce rapport tend vers la force de l'oscillateur \bar{f}_{f_i} dont la somme est égale à l'unité selon la règle de sommation de Thomas Reiche-Kuhn. Ceci conduit à une variation nulle de l'énergie ($\Delta E_i = 0$) . en accord avec l'hypothèse qui consiste à négliger le déplacement Stark de l'état fondamental $|1s\rangle$ (valable pour la fréquence du laser Ti : Saphir). On en déduit donc que pour des lasers intenses, seuls les états de Rydberg et les états du continuum sont décalés d'un terme correspondant au potentiel pondéromoteur U_P . Une conséquence évidente de ce déplacement Stark est le décalage Stark du seuil d'ionisation (voire fig. (1.3)) qui se traduit par une augmentation de I_P du terme Up tel que le nouveau potentiel d'ionisation I'_P s'écrive :

$$I'_P = I_P + U_P \tag{1.8}$$



FIGURE 1.3 – Décalage Stark sur les différents niveaux d'énergie. Le potentiel d'ionisation I_P augmente d'un terme correspondant au potentiel pondéromoteur U_P .

Dans le cas où le déplacement Stark de $|1s\rangle$, ΔE_{1S} serait non nul. le potentiel d'ionisation s'écrirait :

$$I'_P = I_P + U_P - \Delta E_{1S} \tag{1.9}$$

1.3.2 Le potentiel pondéromoteur

Le potentiel pondéromoteur correspond à l'énergie cinétique moyenne d'un électron libre en mouvement dans un champ électrique oscillant. En effet, de la relation fondamentale de la dynamique classique

$$F = m\ddot{x},\tag{1.10}$$

et considérant que l'électron est au repos à l'origine (temps) et le champ électrique $\xi(t)$ sous la forme

$$\xi(t) = \xi_0 \cos(wt), \tag{1.11}$$

11

(en occurrence $\mathbf{F} = -e\xi = \xi_0 cos(wt)$) la vitesse v s'écrit :

$$v = \dot{x} = \frac{e\xi_0}{mw} sin(wt). \tag{1.12}$$

De l'équation (1.13) on a l'énergie cinétique E_c de l'électron :

$$E_C = \frac{e^2 \xi_0^2}{4mw^2} \sin^2(wt) \tag{1.13}$$

et l'énergie cinétique moyenne $\langle E_C \rangle$ s'écrit en mettant à profit $\langle sin^2(wt) \rangle = 1/2$

$$\langle E_C \rangle = \frac{e^2 \xi_0^2}{4mw^2} = U_P, \qquad U_P(u.a) = \frac{I_0(u.a)}{4w(u.a)}$$
(1.14)

Dans cette équation (1.15), I_0 est l'intensité laser correspondant à l'amplitude maximale ξ_0 du champ laser. Ce potentiel caractérise l'échelle d'énergie nécessaire pour considérer qu'un électron est libre. Il est important de noter que l'énergie cinétique maximum donnée en (1.14) est le double du potentiel pondéromoteur ($2U_P$) pour les photoélectrons.

1.4 Le paramètre de Keldysh

Les approximations

La théorie de Keldysh, élaborée pour expliquer le mécanisme d'ionisation, est basée sur les approximations suivantes :

- on suppose que le champ est quasi-stationnaire avec $w \ll I_P, I_P;$
- on suppose que la fréquence du laser w est inférieure à la fréquence de transition de l'état fondamental vers le premier niveau excité;
- on suppose que le taux d'ionisation est faible.

Le paramètre de Keldish

Dans ces conditions, le potentiel coulombien $\frac{1}{r}$ et le champ électrique en jauge longueur $E(t).\vec{r}$ forment dans la direction opposée au champ, une barrière de potentiel effective vue par l'électron lié. Lorsque le champ polarisé linéairement suivant z et oscillant lentement (du fait de la faible valeur de la fréquence) atteint une valeur suffisamment grande, le potentiel effectif forme une barrière de potentiel dans la direction de z opposée à E(t)[8]. Un raisonnement classique consiste à évaluer un temps tunnel τ_t qui correspondrait au temps nécessaire à l'électron pour franchir une distance d_k , équivalente à la largeur de la barrière formée par le champ électrique et le potentiel au niveau de I_P . En supposant que cette distance est donnée en première approximation par $d_k = \frac{I_P}{E_0}$ (u.a.) et que la barrière est franchie avec une vitesse moyenne $v = \sqrt{2I_P}$, le temps tunnel est donné par :

$$\tau_t = \frac{2\pi}{E} \sqrt{2I_P} \tag{1.15}$$

Le paramètre de Keldysh représente le rapport entre le pseudo temps-tunnel τ que met l'électron pour traverser la barrière et la période laser T.

$$\gamma = \frac{\tau}{T} = \sqrt{\frac{I_P}{2U_P}} \tag{1.16}$$

Ce paramètre permet de discriminer les différents régimes d'ionisations [6]. En effet,
si γ ≫ 1, c'est à dire dans le régime des champs faibles, le temps tunnel est trop long et la barrière remonte avant qu'un paquet d'onde n'ait pu être émis. La fonction d'onde reste localisée proche du noyau car l'interaction avec le potentiel coulombien permet à l'électron d'absorber des photons et de s'ioniser : c.est l'ionisation multiphonique(MPI) qui prédomine.

- Si $\gamma \ll 1$, c'est à dire dans le régime des champs forts, le temps tunnel est très petit par rapport à la période T du laser : c'est l'ionisation tunnel (TI) qui prédomine.
- si $\gamma \simeq 1$, les deux processus (MPI et TI) peuvent avoir lieu : il s'agit du régime intermédiaire dans lequel la description des processus d'ionisation est complexe à modéliser.

L'ionisation tunnel ($\gamma \ll 1$) est l'élément fondamental d'une approche qui a longtemps servi comme modèle de description de la dynamique d'ionisation.

1.5 Mécanismes d'ionisation dans les atomes

Dans cette section il est question de décrire la dynamique d'ionisation qui se produit dans l'atome lorsque celui-ci est placé dans un champ laser. Nous nous limitons uniquement aux proccessus clés qui nous concerement dans notre travail.

1.5.1 Ionisation multiphonique

L'ionisation multiphotonique (MPI) est un processus d'absorption simultanée d'un nombre de photons menant l'atome dans un état ionisé. Ce phénomène est possible lorsque l'énergie du photon est inférieure au potentiel d'ionisation I_P , c'est à dire : $\hbar w \ll I_P$ et l'intensité I du champ est relativement faible $I < 10^{13} W.cm^{-2}$. Sous cette condition le potentiel coulombien n'est pas déformé de manière significative, ce qui signifierait que l'ionisation tunnel n'est pas accessible. Ce processus est expliqué de façon schématique par la figure (1.4) ci-dessous :



FIGURE 1.4 – Ionisation multiphotonique. L'électron absorbe simultanément n photons pour quitter l'état fondamental et se retrouver dans le continuum [4].

Le processus d'ionisation multiphonique peut se résumer par la réaction suivante

$$n\hbar w + A \longrightarrow A^+ + e^-,$$
 (1.17)

où n est un entier représentant le nombre minimum de photons d'énergie $\hbar w$ nécessaire pour ioniser l'atome A. Ce phénomène, considéré comme une extension de l'effet photoélectrique (n = 1 et $\hbar w \simeq I_P$), a été observé pour la première fois vers le milieu des années 60 [9 10]. Les travaux ont été poursuivis par plusieurs groupes en particulier celui de saclaiy [10 11] où le rendement d'ions produits a été étudié en fonction de l'intensité du Laser.

1.5.2 Ionisation au dessus du seuil

L'ionisation au dessus du seuil (Above Threshold Ionisation (ATI)) est un processus caractérisé par le fait que l'électron bien que dans le continuum continue à absorber des photons en plus des n minimum nécessaires pour ioniser l'atome A [5 7]. Donc absorbe au total un nombre N = n + s de photons. Elle est observée

15

pour les intensités du champ très élèvées $I > 10^{13} w cm^{-2}$ et des fréquences $w \ll I_P$ car à cette intensité le système atomique est fortement couplé au champ laser. La principale caractéristique du spectre ATI est la séparation des pics d'absorption par l'énergie $\hbar w$ du photon. En d'autres termes on note l'apparition des sous structures dans le spectre ATI. A ce niveau, l'électron peut avoir une énergie cinétique supérieure à celle donnée par la relation de conservation suivante :

$$E_{cin} = nw - I_P(I) \tag{1.18}$$

16

L'énergie cinétique en ce qui concerne l'ionisation au dessus du seuil est résumée par la relation suivante :

$$E_{cin} = (n+s)w - (I_P + U_P)$$
(1.19)

où n est le nombre minimum de photons nécessaires pour dépasser I_P et s = 0, 1, est l'excès de photons absorbés au dessus du seuil.

$$(n+s)\hbar w + A \longrightarrow A^+ + e^- \tag{1.20}$$

Ce processus est décrit schématiquement par la figure (1.5) ci-dessous :



FIGURE 1.5 – Description schématique du processus d'ionisation au dessus du seuil [5]. L'électron bien qu'ayant franchit le potentiel d'ionisation Ip continu à absorber des photons.

Une autre caractéristique d'un spectre ATI est la présence de deux régions d'énergies importantes limitées respectivement en 2Up et en 10Up.



FIGURE 1.6 – Spectre ATI calculé par l'ESDT du potentiel séparable dans l'espace des moments. Les paramètres lasers sont donnés en bas du graphe [4]. Les lignes verticales en pointillées marquent la position des coupures respectivement à 2Up (marron), et 10Up (vert).

La première région dite partie basse énergie correspondant à l'énergie cinétique maximum de l'électron libre dans le champ laser s'étend jusqu'à 2Up. L'intensité des pics diminue très rapidement de trois ou quatre ordres de grandeur et s'en suit un plateau qui s'étend à son tour jusqu'à 10Up suivi d'une coupure abrupte. cette deuxième région est dite haute énergie.Cette structure du spectre ATI a été clairement expliqué par le modéle classique simple à trois étapes : en effet, l'électron éjecté peut revenir vers le noyau à une certaine phase du champ. Il est soit diffusé élastiquement en interagissant avec le potentiel Coulombien, ce qui explique la région du plateau dans le spectre ATI [10], soit il se recombine à l'ion résiduel en émettant un photon fortement énergétique. Ce qui correspond à la génération d'harmoniques d'ordre élevé. La majorité des photoélectrons qui ne sont pas diffusés après leur éjection de l'atome, contribue uniquement à la basse région de basse énergie.

1.5.3 Ionisation tunnel

Contrairement aux processus MPI et ATI basés sur un modèle purement photonique pour prédire l'énergie cinétique de l'électron après ionisation, l'ionisation tunnel illustrée sur la figure (1-7.(a)) ci dessous permet de voir l'ionisation sous un autre angle. Elle prend naissance lorsque les intensités sont suffisamment grandes $(10^{14} - 10^{15}W.cm^{-2})$ en basse fréquence. En effet, dans ce régime d'intensité où la théorie de perturbation n'est plus du tout valide, la force du champ électrique généré $(10^8 - 10^9V.cm^{-2})$ est comparable à celle du potentiel coulombien. Lorsque le paramètre de Keldysh γ est inférieur à 1, le processus qui prédomine est celui de l'ionisation tunnel [10]. Nous utilisons une description basée sur un potentiel simpliste qui ne décrit en aucun cas la complexité du potentiel d'une molécule : $V_0 = \frac{-1}{x}$. Lorsque l'électron subit un champ électrique intense γ dû à la focalisation du faisceau laser, alors le potentiel coulombien devient (en unité atomique) :

$$V(X) = V_0 + \xi x = \frac{-1}{x} + \xi x \tag{1.21}$$

Lorsque le champ électrique est intense, la barrière s'abaisse périodiquement dans la direction de polarisation permettant ainsi une ionisation par effet tunnel et l'électron a une probabilité non nulle de se retrouver de l'autre côté de la barrière de potentielle. Dans le cas où le champ électrique est suffisamment fort on peut assister à une ionisation par suppression de barrière de potentiel. La quantité I_{Sat} , appelée éclairement de saturation, correspond à l'éclairement minimal permettant d'obtenir une probabilité d'ionisation égale à 1. Cela peut être assimilé à l'éclairement nécessaire pour abaisser la barrière au niveau de l'état fondamental (ionisation par suppression de barrière) où se situe l'électron, vidant cet état de sa population. Lorsque l'on atteint cet éclairement, les espèces du milieu ne peuvent plus générer des har-

Mémoire de DIPES II * Laboratoire de simulation et de biophysique moléculaire Saha Etienne Dieudonne ©ENS 2015-2016

moniques d'ordre élevé puisque l'état fondamental sera complètement dépeuplé , ne permettant pas à la fonction d'onde de se recombiner sur cet état fondamental. Pour retrouver cette valeur I_{sat} , il faut que la dérivée du potentiel soit nulle $V'_0(x_0) = 0$ et que le potentiel soit abaissé de la valeur du potentiel d'ionisation $V'_{sat} = -I_P$. On trouve [5] :

$$E_{sat} = \frac{(I_P)^2}{4}$$
(1.22)

et on trouve

$$I_{sat} = \frac{(I_p)^4}{16} \tag{1.23}$$

$$I_{SAT}[W/cm^2] = (4.10^9 I_P)^4 [eV]$$
(1.24)



FIGURE 1.7 – Deux régimes d'ionisations a) effet tunnel et b) suppression de la barrière [6].

1.6 Conclusion

Dans ce chapitre, après une brève description du champ laser, nous avons présenté les différents processus qui interviennent lors de l'interaction des atomes et d'une impulsion laser. Nous avons defini certaines notions importantes comme le déplacement Stark et le potentiel pondéromoteur. Enfin nous avons exposé quelques processus intervenant dans la dynamique d'ionisation. ces notions sont d'un grand interêt pour la compréhension physique du probléme central qui nous intéresse dans notre travail. Ce probléme central est formulé au chapitre suivant .

ETUDE THEORIQUE DE L'IONISATION DE L'ATOME D'HYDROGENE : APPROCHE QUASI-ANALYTIQUE DANS L'ESPACE DES MOMENTS

2.1 Introduction

Dans ce chapitre nous présentons sommairement une nouvelle approche dite quasi analytique pour résoudre l'ESDT directement dans l'espace des impulsions. Cette approche modélise la dynamique de l'ionisation de l'hydrogène atomique en interaction avec un champ laser intense. La théorie s'appuie sur le dévoppement en série de potentiels séparables chacun soutendu par un niveau discret de l'atome.Nous rappelons la structure de l'atome d'hydrogène, passons en revue le hamiltonien du système sous ses formes longueur et vitesse, puis nous formulons le modèle proprement dit et terminons par le calcul de quelques observables physiques.

2.2 Structure atomique de l'atome d'hydrogène

2.2.1 Fonction d'onde

La fonction d'onde $|\Psi(t)\rangle$ décrivant l'évolution d'un système quantique est obtenue en résolvant l'équation de Schrödinger dépendante du temps (ESDT). Cette partie va nous permettre de rappeler ses caractéristiques principales ainsi que toutes les notions classiques liées à la résolution de l'équation de Schrödinger. Par ailleurs le hamiltonien d'un atome d'hydrogène s'écrit : $H = \frac{P^2}{2m} + V$, où V est le potentiél Coulombien et p correspond à l'opérateur $-i\hbar\nabla$. En unités atomiques, L'équation de Schrödinger dépendante du temps s'écrit :

$$-i\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}\right]\Psi(\mathbf{r},t).$$
(2.1)

Les solutions de cette équation pour E < 0 sont données par les formules générales ci dessous [12] :

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$
(2.2)

Dans cette formule, $R_{nl}(r)$ représente la partie radiale de la fonction et $Y_{lm}(\theta, \phi)$ sont des harmoniques sphériques, n le nombre quantique principale, l le nombre quantique orbital, m le nombre quantique magnétique. Dans cette équation (2.2) $R_{nl}(r)$ est donnée par :

$$R_{nl}(r) = \frac{2Z}{n^2} \sqrt{\frac{Z(n-l-1)!}{(n+l)!}} (\frac{2Zr}{n})^l exp(-\frac{Zr}{n}) L_{(n-l-1)}^{(2l+1)}(\frac{2Zr}{n})$$
(2.3)

Dans cette relation $L_{n-l-1}^{(2l+1)}$ est le polynôme de Laguerre généralisé. Dans le cadre de notre travail, nous allons nous intéresser aux états $|1s\rangle$, $|2s\rangle$, $|2p\rangle$. les fonctions d'onde pour ces états sont données par les formules suivantes :

$$\Psi_{1s}(\mathbf{r}) = 2Z^{\frac{3}{2}}exp(-Zr)Y_{00}(\theta_r, \phi_r)$$

$$\Psi_{2s}(\mathbf{r}) = (\frac{Z}{2})^{\frac{3}{2}}exp(2-Zr)Y_{00}(\theta_r, \phi_r)$$

$$\Psi_{2p,m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{3}}(\frac{Z}{2})^{\frac{3}{2}}exp(-Zr)Y_{1m}(\theta_r, \phi_r)$$
(2.4)

Nous utiliserons les fonctions d'ondes qui sont solution de l'équation (2.5) .Cette dernière est la transformée de fourrier de l'équation (2.1). Nous obtenons (en unités atomiques) l'ESDT dans l'espace des moments :

$$\left[i\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\mathbf{P}^2}{2}\right]\Phi(\mathbf{P}, t) - \frac{\int d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3}V(\mathbf{p}, \mathbf{p}')\Phi(\mathbf{p}', t) = 0$$
(2.5)

Les solutions de cette équation sont connues et sont données dans la littérature [7], nous rappelons quelques unes de ses solutions qui vont nous aider dans la suite de notre travail :

$$\Phi_{1S}(\mathbf{p}) = \frac{16\pi\sqrt{Z^5}}{(P^2 + Z^2)^2} Y_{00}(\theta_P, \phi_p)$$

$$\Phi_{2S}(\mathbf{P}) = \frac{64\pi\sqrt{2Z^5}(4P^2 - Z^2)}{(4P^2 + Z^2)^3} Y_{00}(\theta_p, \phi_p)$$

$$\Phi_{2P,m}(\mathbf{p}) = 128\pi\sqrt{\frac{8}{3Z^3}} \frac{Z^5P}{(4P^2 + Z^2)^3} Y_{1m}(\theta_P, \phi_P)$$
(2.6)

2.2.2 Spectre d'énergie

Les états liés de l'atome d'hydrogène correspondent à une énergie négative (E < 0). Les valeurs possibles de l'énergie sont les suivantes [13] :

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right) \frac{m}{\hbar\hbar^2} = -\frac{1}{2n^2} (u.a) \qquad n = 1, 2, \dots$$
(2.7)

Où n est le nombre quantique principal. Chaque niveau d'énergie est n^2 fois dégénérés. Pour caracteriser les états propres correspondants, on utilise les nombres quantiques angulaires, l=0,...,n-1, on parle d'état s, p, d, f, g, h,..., et magnétique, m = -l,...,l. L'état de plus basse énergie, ou état fondamental, correspond donc à n = 1 et l = 0 c'est l'état $|1S\rangle$ d'énergie -1/2. Le potentiel d'ionisation vaut $I_P = 1/2u.a.$ il faut noter que les énergies positives apparaissent aux continuun, ils forment un spectre continu.Les expressions de leurs fonctions d'ondes sont connues analytiquements, elles correspondent à des pertubations d'ondes planes. Le spectre d'énergie de l'atome d'hydrogène est donné par la figure (2.1) [6].



FIGURE 2.1 – Spectre d'énergie de l'atome d'hydrogène et notation spectroscopique.

2.3 Hamiltonien atome-champ

Approximations

Dans cette partie, on va faire une étude portant sur l'interaction d'un atome d'hydrogène avec un champ laser intense. De ce fait, nous résolvons l'équation de Schrödinger dépendante du temps qui décrit de manière plus précise l'évolution de la fonction d'onde d'un système quantique donnée par l'équation suivante :

$$i\hbar|\Psi(\mathbf{r},t)\rangle = H|\Psi(\mathbf{r},t)\rangle$$
 (2.8)

Avant de faire une analyse plus poussée d'un tel système, il est intéressant de poser des hypothèses qui vont nous aider à simplifier de façon systématique notre problème [11] :

Première approximation : Le noyau est supposé avoir un déplacement négligeable car sa masse est très grande devant celle de l'électron, mais pour l'utilisation

Mémoire de DIPES II * Laboratoire de simulation et de biophysique moléculaire Saha Etienne Dieudonne ©ENS 2015-2016

des champs très intenses, cette hypothèse est relativisée.

Deuxième approximation : Les intensités et les énergies de photon à considérer sont celles pour les quelles tout effet relativiste est négligé, cet effet étant à considérer à partir de $I = 10^{18} W.cm^{-2}$

Troisième approximation : Tous les couplages de type spin-orbite seront considérés comme négligeables.

Quatrième approximation : Aucun champ magnétique dû à la force de Lorentz n'est pris en compte dans les traitements ultérieurs. Mais, cette affirmation devient non fondée pour des intensités très élevées (supérieur a $I = 10^{-2} W.cm^{-2}$).

Cinquième approximation : L'interaction las er-atome sera décrite dans le cadre de l'approximation dipolaire électrique. Les intensités considérées sont de l'ordre de $10^{14} - 1O^{15}W/cm^2$

Jauge longueur

Le Hamiltonien atomique est donné par la relation suivante [3] :

$$H = H_0 + H_I$$
 avec $H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V$

et

$$H_I = -\frac{q}{m}\mathbf{A}(t).P + \frac{q^2}{2m}(\mathbf{A}(t))^2$$
(2.9)

 H_I est le hamiltonien d'interaction.

Cet Hamiltonien d'interaction contient deux termes : un terme paramagnétique et un terme diamagnétique. Quant au dernier terme, il ne contribue pas aux transitions radiatives mais déplace tout simplement les niveaux d'énergies. Il introduit une oscillation rapide de la phase temporelle de la fonction d'onde. Pour faciliter la stabilité des codes numériques afin de résoudre l'équation de Schrödinger avec aisance, nous introduisons la jauge longueur qui est en effet une transformation unitaire. On introduit la transformation T_l proposée par Goppert Mayert [14]

$$T_l = exp(\frac{i}{\hbar}q\mathbf{A}(t).\mathbf{r})$$
(2.10)

En posant $\Psi(\mathbf{r}, t) = T_l \Psi(\mathbf{r}, t)$ et après un calcul plus détaillé on trouve que $\Psi_i(\mathbf{r}, t)$ est solution de l'équation :

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_i(t)\rangle = \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V - q\mathbf{r}\mathbf{E}(\mathbf{t})\right]|\Psi_i(t)\rangle$$
(2.11)

Où $H_i(t) = -q\mathbf{r}\mathbf{E}(t)$ est le hamiltonien d'interaction

Dans cette forme, le moment canonique $\mathbf{P}_l = \mathbf{P}$ coïncide avec le moment mécanique $\pi = m\mathbf{V}$ associé à la vitesse \mathbf{v} de la particule ($\mathbf{P} = \pi$). Ainsi, les états propres du hamiltonien H_0 décrivent les mêmes états physiques que le hamiltonien standard H, tous associés à l'énergie propre de la particule en d'autres termes, un état propres de H_0 reste un état physique. La jauge longueur est celle qu'utilise l'approximation du champ fort. En effet, cela s'explique physiquement par le fait que l'état fondamental conserve sa signification physique

Jauge vitesse

En appliquant la transformation de jauge $T_V(t)$

$$T_V(t) = exp(-\frac{i}{\hbar} \frac{q^2}{2m} \int_0^t dt' \mathbf{A}^2(t')), \qquad (2.12)$$

On obtient l'équation d'évolution de $\Psi_V(\mathbf{r},t) = T_V(t)^{-1} \Psi(\mathbf{r},t)$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_v(t)\rangle = \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V - \frac{q}{m}\mathbf{A}(t).P\right]|\Psi_V(t)\rangle$$
(2.13)

Contrairement au cas précédent, le moment canonique $\mathbf{P}_V = \mathbf{P}$ ne coïncide pas pendant l'interaction avec le moment mécanique $\pi = \mathbf{P} - q\mathbf{A}(t)$ associé à la vitesse v de la particule $(P \neq \pi)$. On en déduit que les états propres du hamiltonien atomique H_0 ne décrivent pas les mêmes états physiques que ceux du hamiltonien standard H durant toute l'interaction. Et par conséquent, le moment canonique n'a de sens physique qu'à la fin de l'interaction ($\mathbf{A}(t) = 0$). Dans le cadre du modèle développé pour ce travail, c'est la jauge vitesse qui sera utilisée

2.4 Théorème d'Ehrenfest

Après avoir éffectué le choix de notre jauge de travail, l'évolution temporelle de la moyenne d'un opérateur peut être étudiée par le théorème d'Ehrenfest [2]. Soit une observable A ayant pour valeur moyenne $\langle A \rangle$ dans l'état ϕ normé a l'unité, la variation par rapport au temps de cette valeur moyenne est donnée grâce au théorème d'Ehrenfest par :

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = (i\hbar)^{-1}\langle \Phi|[A,H]|\Phi\rangle + \langle \Phi|\frac{\partial}{\partial t}|\Phi\rangle.$$
(2.14)

Dans cette relation, l'hamiltonien H est un opérateur hermitien. Lorsque l'opérateur A ne dépend pas explicitement du temps, alors $(\frac{\partial A}{\partial t} = 0)$, et l'expression (2.14) précédente devient tout simplement :

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{1}{i\hbar}[\langle \Phi | [A, H] | \Phi \rangle]$$
(2.15)

Si en plus l'opérateur A commute avec le hamiltonien H, sa valeur moyenne $\langle A \rangle$ ne varie donc pas avec le temps; l'observable A est par conséquent une constante du mouvement [12]. Dans le cas particulier où l'opérateur A est le moment canonique P, nous aurons :

Dans la forme longueur

Mémoire de DIPES II * Laboratoire de simulation et de biophysique moléculaire Saha Etienne Dieudonne ©ENS 2015-2016

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{P} \rangle = \frac{1}{i\hbar} [\langle \Phi | [\mathbf{P}, H_1] | \Phi \rangle] = -\langle \Phi | \nabla V | \Phi \rangle + q\xi(t)$$
(2.16)

Où on voit bien le rôle du potentiel coulombien découplé de celui du champ électrique $\xi(t)$ du point de vue de l'interprétation en termes de force. Ainsi l'évolution du système peut être suivie à tout moment.

Dans la forme vitesse.

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{P} \rangle = \frac{1}{i\hbar} [\langle \Phi | [\mathbf{P}, H_V] | \Phi \rangle] = -\langle \Phi | \nabla V | \Phi \rangle, \qquad (2.17)$$

Où l'évolution du moment canonique **P** tel que $\Pi(t) = v(t) = p(t)HA(t)$ se réduit tout simplement à l'opposé du gradient de potentiel coulombien sur la fonction d'onde. Il va donc de soi que si le systeme Φ est tel que $\langle \nabla V \rangle = 0$, alors le moment canonique \vec{p} devient une constante du mouvement. Un système satisfaisant immédiatement cette condition dans le cas de l'interaction laser-atome est celui d'une particule libre oscillant dans le champ laser.

2.5 Equation de Schrödinger dans l'espace des moments : cas du Potentiel séparable

2.5.1 Formulation du problème

Dans cette section on présente un nouveau modèle pour résoudre l'ESDT. En effet lorsqu'un atome d'hydrogène est exposé à un champ laser intense, polarisé linéairement le long du vecteur unitaire Z, sa dynamique d'ionisation est régie par l'équation ci-dessous [8] :

$$i\frac{\partial\Phi(\mathbf{p},t)}{\partial t} - \frac{\mathbf{p}^2}{2}\Phi(\mathbf{p},t) + (\mathbf{p}.\mathbf{e})(\frac{\partial}{\partial t}b(t)\Phi(\mathbf{p},t)) - \int\frac{d\mathbf{p}'}{(2\pi)^3}V(\mathbf{p},\mathbf{p'})\Phi(\mathbf{p'},t) = 0 \quad (2.18)$$

Dans cette équation

$$b(t) = -\int_{-\infty}^{t} dt' \mathbf{A}(t'),$$

$$\Phi(\mathbf{p},t) = \int drexp(-i\mathbf{p}.\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r},t), \qquad (2.19)$$

 $\mathbf{A}(t')$ est le potentiel vecteur associé au champ électrique E. L'expression du noyau ou "kernel" $V(\mathbf{p},\mathbf{p}')$ est la transformée de fourrier du potentiel coulombien exact $V(\mathbf{r})$ et a pour expression donnée ci-dessous

$$V(\mathbf{p,p'}) = \frac{4\pi Z}{|\mathbf{P-P'}|^2},\tag{2.20}$$

Dans cette formule, Z représente la charge du noyau. La présence de la singularité dans le noyau $V(\mathbf{p},\mathbf{p'})$ rend difficile la résolution de cette équation. L'idée de remplacer le potentiel coulombien exact V(p,p') par une somme finie de potentiel séparable dans laquelle chaque terme représente un état lié de l'atome d'hydrogène permet de contourner cette difficulté et de simplifier de façon significative la résolution de cette équation. Nous supposerons qu'à l'état initial $\Phi(\vec{p},t=0)=\Phi_{1s}(\mathbf{p})$ (voir équation 2.6) et que le paquet d'ondes est normalisé comme suit :

$$\int \frac{\mathbf{dp}}{(2\pi)^3} |\Phi(\mathbf{p}, t)|^2 = 1$$
(2.21)

2.5.2 Construction des potentiels séparables

Ici, le noyau $V(\mathbf{P},\mathbf{P'})$ de potentiel coulombien non local est approximé par une somme de potentiels symétriques séparables par la relation [4].

$$V(\mathbf{p},\mathbf{p'}) \approx -\sum_{n=1}^{N} v_n(\mathbf{P}) v_n^*(\mathbf{p'})$$
(2.22)

Dans cette approximation, le noyau aura N états propres $|\Phi\rangle$ correspondant aux énergies propres E_n . On aura alors l'équation aux valeurs propres suivante :

$$(\epsilon_j - \frac{P^2}{2})\Phi_j(\mathbf{P}) + \sum_{n=1}^N a_{jn}V_n(\mathbf{P}) = 0$$
(2.23)

Avec les coefficients a_{jn} qui sont donnés par les formules suivantes :

$$a_{jn} = \int \frac{d\mathbf{p'}}{(2\pi)^3} v_n^*(\mathbf{p'}) \Phi_j(\mathbf{p'}). \qquad (2.24)$$

Si on introduit les matrices suivantes : $A(\text{réelle, symétrique, } N \times N \text{ éléments}), V$ (matrice colonne), Φ (matrice colonne) d'éléments respectifs $a_{jn}, v_n(p), (\epsilon_j - \frac{P^2}{2})\Phi_j$, l'équation (2.21) donnant le potentiel coulombien prend la forme suivante

$$\Phi = -AV. \tag{2.25}$$

En introduisant la matrice symétrique carré d'ordre N, $\Gamma = AA^T$ avec A^T la transposée de la matrice A, les éléments de la matrice Γ sont donnés par la relation suivante :

$$\gamma_{ij} = -\int \frac{\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \Phi_i^*(\mathbf{p}) (E_j - \frac{p^2}{2}) \Phi_j(\mathbf{p}) = Z \int \frac{d\mathbf{r}}{r} \Phi_i^*(\mathbf{r}) \Phi_j(\mathbf{r}).$$
(2.26)

Dans cette formule, $\Phi(\mathbf{r})$ est la fonction d'onde associée à un état lié du potentiel coulombien dans l'espace des configurations. L'intégrale (2.26) n'admet pas toutes les transitions. Elle ne permet que des transitions ns vers ms, np vers mp, nd vers md appelés des transitions permises [4]. Le noyau peut être décomposé en série de fonctions suivant la relation ci-dessous :

$$V(\mathbf{p},\mathbf{p'}) \approx = -V^s(\mathbf{p},\mathbf{p'}) - V^P(\mathbf{p},\mathbf{p'}) - V^d(\mathbf{p},\mathbf{p'}) - \dots \dots \qquad (2.27)$$

où les $V^{l}(\mathbf{p},\mathbf{p'})$ sont donnés par la relation :

$$V^{l}(\mathbf{p,p'}) = \sum_{j=1}^{N_{1}} V^{l}_{j}(\vec{p}) V^{l}_{j}(\vec{p'}) \langle Y_{l}(\vec{p}). Y_{l}(\vec{p'}) \rangle.$$
(2.28)

Mémoire de DIPES II * Laboratoire de simulation et de biophysique moléculaire Saha Etienne Dieudonne ©ENS 2015-2016

Le moment angulaire utile des N niveaux d'énergie de l'atome considéré est N_l et $\langle Y_l(p).Y_{P'}\rangle >$ est le produit scalaire des harmoniques sphériques.

2.5.3 Mise en équation matricielle

Nous avons décomposé le noyau du potentiel coulombien en une somme de potentiels séparables et symétriques comme le montre la relation (2.21). En la remplaçant dans l'équation (2.18), l'équation quadridimensionnelle de départ se transforme en un système d'équations linéaires couplées de Voltera de seconde espèce. Cette transformation génère une fonction notée F(t) qui contient la quasi totalité de l'information sur la dynamique du système [4].

$$\mathbf{F}(t) = F_0(t) + \int_0^t K(t,\xi) \mathbf{F}(\xi) d\xi \qquad (2.29)$$

le noyau K (t,
 $\xi)$ est une matrice symétrique $N\times N$

 $\mathbf{F}(t)$ et $F_0(t)$ sont des matrices colonnes de dimension N definies par

$$\mathbf{F}(\xi) = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ . \\ . \\ . \\ F_N \end{pmatrix} = (F_i(\xi)); i = 1, 2, \dots N$$
(2.31)

$$\mathbf{G}(t) = \begin{pmatrix} F_{01}(t) \\ F_{02}(t) \\ . \\ . \\ . \\ F_{0N}(t) \end{pmatrix} = (F_{0i}(t)), i = 1, 2, \dots N$$
(2.32)

La résolution numérique du système d'équations de voltera de 2^{nd} éspèce (2.28) nécessite une décomposition des éléments K_{ij} du noyau suivant la relation ci- après :

$$K_{ij}(t,\xi) = C_{ij}^T(t,\xi) + \sqrt{t-\xi} K_{ij}(t,\xi), i = 1, 2, ..., N$$
(2.33)

où K_{ij}^T est une fonction régulière et C_{ij}^T une variable complexe. Ce changement de fonction permet de faire disparaître la singularité que présentent les composantes K_{ij} du noyau $K(t,\xi)$. En substituant (2.29), (2.30), (2.31), (2.32) dans le système d'équation de voltera de 2^{nd} espèce (2.28), on aboutit à la formule générale de $F_i(t)$ ci dessous :

$$F_{i}(t) = g_{i}(t) + \sum_{j=1}^{N} \int_{0}^{t} K_{ij}^{T}(t,\xi) F_{j}(\xi) d\xi \qquad (2.34)$$
$$= g_{i}(t) + \sum_{j=1}^{N} \left[\int_{0}^{t} (C_{ij}^{T}(t,\xi) + \sqrt{t-\xi} K_{ij}^{T}(t,\xi)) F_{j}(\xi) d\xi \right]$$
$$= g_{i}(t) + \sum_{j=1}^{N} \int_{0}^{t} C_{ij}^{T}(t,\xi) F_{i}(\xi) d\xi + \sum_{j=1}^{N} \int_{0}^{t} \sqrt{t-\xi} K_{ij}^{T}(t,\xi) F_{j}(\xi) d\xi , \quad i = 1, 2, \dots, N$$

La décomposition ci-dessus est une formulation numérique générale du système d'équations linéaires couplées de type voltera de second espèce du modèle d'un potentiel séparable comportant N états atomiques de l'hydrogène .Dans la suite, nous allons décrire le modèle coulombien du potentiel dans les états ayant les niveaux d'énergie 1s, 2s, 2p.

Mémoire de DIPES II * Laboratoire de simulation et de biophysique moléculaire Saha Etienne Dieudonne @ENS 2015-2016

2.5.4 Application au cas du potentiel (1s+2s+2p)

Lorsque le noyau supporte l'état fondamental 1s, le premier état excité 2s, le deuxième état excité 2p alors il est développé en série sous la forme suivante :

$$V(\mathbf{p},\mathbf{p'}) \simeq -V^s(\mathbf{P},\mathbf{p'}) - V^p(\mathbf{P},\mathbf{P'})$$
(2.35)

avec,

$$V^{s}(\mathbf{p},\mathbf{p'}) \approx V_{1}^{a}(p)V_{1}^{(a)*}(p')(p,p') + V_{2}^{a}(P)V_{2}^{(a)*}(P)$$

$$V^{P}(\mathbf{P},\mathbf{P'}) = \frac{4\pi}{3}PP'V_{3}^{(P)*}(p') \times \sum_{m=-1}^{+1}Y_{1m}(\mathbf{P})Y_{1m}^{*}(p)$$
(2.36)

où

$$V_1^a(\mathbf{P}) = \frac{4\sqrt{\pi}}{(P^2+1)} \tilde{a_{22}} - \frac{4\sqrt{2\pi}}{(4P^2+1)^2} \tilde{a_{12}}$$

$$V_2^a(\mathbf{P}) = -\frac{4\sqrt{\pi}}{(P^2+1)} \tilde{a_{12}} + \frac{4\sqrt{2\pi}}{(4P^2+1)^2} \tilde{a_{11}}$$

$$V_3^P(\mathbf{p}) = \frac{\sqrt{8\pi}}{(P^2+\frac{1}{4})^2} .$$
(2.37)

Les $\tilde{a_{ij}}$ sont données dans [4] et le terme $Y_m(p)$ représente les harmoniques sphériques dans l'espace des moments et $m(-l \le m \le +l)$ le nombre quantique magnétique. En remplaçant V(p, p') dans l'équation (2.18); par son expression (2.34), on obtient l'équation suivante :

$$[i\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\mathbf{p}^2}{2} + (\mathbf{P}.\mathbf{e})(\frac{\partial}{\partial t}b(t))]\Phi(\mathbf{P},t) + V_1^a(\mathbf{p})F_1(t) + V_2^a(\mathbf{p'})F_2(t) + \frac{4\pi}{3}PV_3^P(P)\Sigma_{m=-1}^{+1}Y_{1m}(\mathbf{P})F_{3m}(t)$$
(2.38)

Dans cette équation,

$$\mathbf{F}_{3m}(t) = F_3(t) Y_{1m}^*(\mathbf{p}) \tag{2.39}$$

$$F_j(t) = \int \frac{d^2 \mathbf{p}}{(2\pi)^3} V_j^a \Phi(\mathbf{P}, t), j = 1, 2$$
(2.40)

$$F_3(t) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} V_3(p)(\mathbf{P}.\mathbf{e})\Phi(\mathbf{P},t).$$
(2.41)

La solution de cette équation est donnée sous forme de paquet d'ondes [14] :

$$\Phi(\mathbf{P},t) = exp(-i\frac{P^2}{2}t +$$
(2.42)

$$ib(t)(\mathbf{P.e}))[\Phi(\mathbf{P},0) + iv_1^a(\mathbf{p})\int_0^t d\xi F_1(\xi)exp(i\frac{p^2}{2}\xi - ib(\xi)(\mathbf{P.e}) + iv_2^a(\mathbf{p})\int_0^t d\xi F_2(\xi)exp(i\frac{p^2}{2}\xi - ib(\xi)(\mathbf{P.e}) + iv_3^a(p)(\mathbf{p.e})\int_0^t d(\xi)F_3(\xi)exp(i\frac{p^2}{2}\xi - ib(\xi)(\mathbf{P.e}))]$$

On montre que les fonctions F_j avec j=1, 2, 3, sont définies par

$$\mathbf{F}_{1}(t) = \mathbf{g}_{1}(t) + \int_{0}^{t} \Sigma_{i=1}^{3} \mathbf{K}_{1i}(t,\xi) F_{i}(\xi) d\xi \qquad (2.43)$$

$$F_{2}(t) = g_{2}(t) + \int_{0}^{t} \Sigma_{i=1}^{3} K_{2i}(t,\xi) F_{i}(\xi) d\xi$$

$$F_{3}(t) = g_{3}(t) + \int_{0}^{t} \Sigma_{i=1}^{3} K_{3i}(t,\xi) F_{i}(\xi) d\xi.$$

que nous mettons sous la forme matricielle :

$$F(t) = G(t) + \int_0^t K(t,\xi)F(\xi)d\xi,$$
(2.44)

Ceci avec les matrices suivantes :

,

$$F(\xi) = \begin{pmatrix} F_1(\xi) \\ F_2(\xi) \\ F_2(\xi) \end{pmatrix}$$
(2.45)

$$G(t) = \begin{pmatrix} g_1(t) \\ g_2(t) \\ g_3(t) \end{pmatrix}$$
(2.46)

$$K(t,\xi) = \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} & K_{13} \\ K_{21} & K_{22} & K_{23} \\ K_{31} & K_{32} & K_{33} \end{pmatrix}$$
(2.47)

où , les termes $g_I(t)$, avec i=1, 2, 3. ont pour exprèssion

$$g_{1}(t) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)_{3}} v_{1}^{s}(p) \Phi_{1s}(\mathbf{p}, 0) exp(-ixp^{2} + iy(\mathbf{p}.\mathbf{e}))$$

$$g_{2}(t) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)_{3}} v_{2}^{s}(p) \Phi_{1s}(\mathbf{p}, 0) exp(-ixp^{2} + iy(\mathbf{p}.\mathbf{e})) \qquad (2.48)$$

$$g_{3}(t) = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)_{3}} v_{3}^{P}(p) \Phi_{1s}(\mathbf{p}, 0) exp(-ixp^{2} + iy(\mathbf{p}.\mathbf{e}))$$

Les K_{ij} donnés par :

$$K_{11}(t) = i \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} (v_1^s)^2 exp(-ixp^2 + iy(\mathbf{p.e}))$$

$$K_{12}(t) = K_{21}(t) = i \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} V_2^s V_1^s exp(-ixp^2 + iy(\mathbf{p.e}))$$
(2.49)

$$K_{22}(t) = i \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} (v_2^s)^2 exp(-ixP^2 + iy(\mathbf{P.e}))$$
(2.49)

$$K_{13}(t) = K_{31}(t) = i \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} V_1^s(p) V_3^P(\mathbf{p}) (\mathbf{p.e}) exp(-ixP^2 + iy(\mathbf{P.e}))$$
(2.49)

$$K_{23}(t) = K_{32}(t) = i \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} V_2^s(\mathbf{p}) V_3^P(\mathbf{p}) (\mathbf{p.e}) exp(-ixP^2 + iy(\mathbf{P.e}))$$
(2.49)

$$K_{23}(t) = K_{32}(t) = i \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} V_2^s(\mathbf{p}) V_3^P(p) (\mathbf{p.e}) exp(-ixP^2 + iy(\mathbf{P.e}))$$
(2.49)

2.5.5 Calcul des observables physiques

Amplitude de transition vers les états du continuum

L'amplitude d'ionisation vers les états du continuum notée $C_k(t)$ peut être calculée en utilisant les états $\varphi^+(k)$ du continuum. son expression est donnée par la formule suivante :

$$C_k^{1s2s2p}(t) = \langle \varphi^+(k) | \Phi(t) \rangle = \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} (\varphi^+(k,\mathbf{p}))^* \Phi(\mathbf{p},t)$$
(2.50)

où les états propres $\varphi^+(k)$ du continuum sont calculés au moyen de l'équation de Lippmann Schwinger . Pour le cas de 3 niveaux (1s + 2s + 2p), ces états sont décrits par :

$$\varphi^{+}(k) = (2\pi)^{\frac{3}{2}}\sigma(p-k) + \frac{2}{k+ig)^{2} - p^{2}} [V_{1}^{s}(p)\tilde{C}_{1}^{+}(K) + V_{2}^{s}(p)\tilde{C}_{2}^{+}(K) + V_{3}^{P}(P)(P.e)\tilde{C}_{3}^{+}(K)]$$

$$(2.51)$$

, où les constantes $\tilde{C}_i^+(k)$ i=1, 2, 3. sont bien etablies et données dans [4] où a été également detaillée l'expression analytique de $C^{1s2s2p}(t)$

Probabilité totale d'ionisation

D'une manière générale, la probabilité d'ionisation s'écrit :

$$P_{ion} = 1 - \sum_{n=1}^{N} |C_i(t)|^2 = \int D(E_K t) dE_K.$$
 (2.52)

Pour le cas de trois états, la sommation va s'effectuer sur les trois états et on aura la formule suivante :

$$P_{ion} = 1 - |C_{1s}(t)|^2 - |C_{2s}(t)|^2 - |C_{2p}(t)|^2$$
(2.53)

avec $C_{1s}(t) = \langle \Phi_{1S} | \Psi(t) \rangle$, $C_{2s}(t) = \langle \Phi_{2s} | \Psi(t) \rangle$, $C_{2P}(t) = \langle \Phi_{2p} | \Psi(t) \rangle$. Pour les détailles de calcul, se référer à [4].

Mémoire de DIPES II * Laboratoire de simulation et de biophysique moléculaire Saha Etienne Dieudonne ©ENS 2015-2016

2.6 Conclusion

En définitive, l'espace des positions rend souvent complexe la résolution de l'équation de Schrödinger . Dans le but de trouver un espace approprié pour cette résolution, nous avons fait recours à l'espace des moments conjointement avec le modèle du potentiel séparable, lequel a permis de faciliter la résolution de cette équation. Ce modèle consiste à remplacer le noyau non local par une somme finie de potentiels séparables dans laquelle chacun d'entre eux supporte un état lié de l'atome d'hydrogène. En procédant ainsi, l'équation de Schrödinger est transformée en une équation intégrale de voltera de 2^{nd} espèce, cela génèr une fonction F(t) qui contient toute l'information sur la dynamique du système. La détermination de la fonction F(t)permet de déduire la fonction d'onde $\Phi(\mathbf{p}, t)$ et par conséquent toutes les autres grandeurs physiques liées à la description du système.

la résolution numérique de cette équation peut être faite en utilisant une technique de résolution appropriée parmi celles existantes dans la littérature. Le chapitre suivant sera consacré à la présentation et à l'interprétation des résultats numériques.

RESULTATS NUMERIQUES ET DISCUSSIONS

3.1 Introduction

Les progrès scientifiques réalisés au cours des dernières décennies, notamment dans le domaine de l'informatique et avec la naissance des supers calculateurs ont rendu facile l'analyse numérique des données en physique atomique. Ainsi, la compréhension d'un phénomène physique passe désormais par la résolution numérique du modèle de ce phénomène. De ce fait, pour comprendre le mécanisme d'éjection de l'électron hors de l'atome en basses fréquences, il est important de faire une analyse numérique du modèle développé au chapitre 2. Ceci nous permettra de faire une analyse sur le rôle joué par le potentiel coulombien. Ce chapitre est subdivisé comme suit : Nous discutons de la densité de probabilité des électrons émis, de la densité de probabilité d'ionisation dans un premier temps et ensuite la population des états discrets dans un second temps. Nous exploitons la méthode numérique bloc par bloc couplée à la quadrature de simpson [15]

3.2 Densité de probabilité en fonction du temps et de la composante P_Z Pour une intensité $I = 3 \times 10^{14} W.cm^{-2}$,

Il est à noter que pour cette valeur de l'intensité, le potentiel pondéromoteur U_P a pour valeur $U_P = 0.658u.a$ et le paramètre de Keldysh a pour valeur $\gamma = 0.616$. On se situe à ce niveau à la limite du régime tunnel. On note aussi que, du fait qu'on utilise la forme vitesse de l'interaction, la probabilité d'ionisation $p_{ion}(t)$ (ainsi que beaucoup d'autres grandeurs) n'a de sens physique qu'à la fin de l'interaction $(t = T_P, \mathbf{A}(t) = 0)$. car les états propres du Hamiltonien standard H ne sont pas états propres du système durant l'interaction. On peut faire une analyse profonde de ce graphe. A t = 0, la fonction d'onde totale coïncide avec l'état fondamental du système. Tout juste après, on observe une densité de probabilité qui oscille avec une périodicité correspondante à celle du champ. En traçant dans le même graphe le potentiel vecteur $\mathbf{A}(t)$ (courbe en bleu), on fait la remarque suivant laquelle la densité de probabilité et le potentiel vecteur sont en opposition de phase. L'interprétation que l'on donne à ces observations est la suivante : à basse fréquence, à la limite du champ fort, l'état fondamental est le seul état lié et de ce fait joue un rôle important dans la dynamique. La fonction d'onde totale coïncide avec cet état fondamental et laisse apparaître des oscillations correspondantes au déplacement de ce dernier dans l'espace des moments. Etant donne que la force de liaison de cet état est très élevée, la population de cet état est considérée immobile et par conséquent, la valeur moyenne de la vitesse $\langle V_Z \rangle = 0$. D'après le chapitre 2 le moment canonique p est définit en jauge vitesse par la relation |6|

$$\mathbf{p}(t) = v(t) - \mathbf{A}(t) \tag{3.1}$$

Compte tenue du fait que dans cet état $\langle V_z \rangle = 0$, la relation précédente devient

$$\langle \mathbf{p}(t) \rangle = -\mathbf{A}(t) \tag{3.2}$$

Ce résultat est en accord avec des observations qui sont faites sur la figure. Avant le deuxième cycle optique, on n'observe pratiquement pas de stries d'ionisation car à cet état, le système ne voit pas encore la périodicité du champ laser et est faiblement ionisé. Après le deuxième cycle optique, nous commençons à observer des stries verticales dont la position reste constante sur l'axe Pz en fonction du temps. Ces stries correspondent à la fraction du paquet d'onde ionisée dont le moment canonique est constant. Pour les états du continuum qui sont localisés loin du noyau, lorsqu'on se situe en première approximation, le potentiel coulombien est considéré comme variant très peu. De ce fait on $a\langle \nabla V \rangle = 0$ et le théorème d'Erenfest se réduit a :

$$\frac{d\langle P\rangle}{dt} = -\langle \nabla V\rangle \approx 0 \tag{3.3}$$

Des stries apparaissent comme la manifestation instantanée de l'ionisation. Elles confèrent à l'espace des moments, le titre de l'espace privilégié pour l'étude de la dynamique d'ionisation lorsqu'il est associé à la forme vitesse de l'interaction. Nous faisons la remarque importante que dans l'espace des moments la densité de probabilité reste localisée durant toute l'interaction, et cela confère un avantage. Pourtant lorsqu'on travail dans l'espace des positions où l'ionisation est définit comme la propagation à l'infini du paquet d'onde, les simulations numériques rencontre des difficultés. Cela est dû à la taille ou dimension des bases. On a également l'énergie cinétique des électrons éjectés et donc aux pics du spectre ATI. Le deuxième avantage qu'offre l'espace des moments et qu'on peut avoir accès en étudiant de près la

fonction $|\Phi(\mathbf{p}_n = 0, Pz, t)|^2$, aux temps t_{ion} d'éjection des électrons hors de l'atome. La figure (3.1) ci-dessous représente l'évolution de la densité de probabilité exacte obtenue en résolvant l'EDST. Les figures (3.2) , (3.3) ,(3.4) représente l'évolution des densités de probabilités pour les potentiels supportant l'état1s, l'état (1s + 2s), l'état (1s + 2s + 2p) respectivement. L'impulsion laser a les caractéristiques suivantes : $I=1.3 \times 10^{14} w/cm^2$, w=0,057u.a. et nc=8 cycle optique .Sur toutes ces figures, la courbe en bleue est la courbe du potentiel vecteur $\mathbf{A}(t)$.



FIGURE 3.1 – Densité de probabilité en fonction du temps et de Pz, $P_n = 0$ obtenue en utilisant le potentiel de coulomb exact [3]



FIGURE 3.2 – Densité de probabilité en fonction du temps et de Pz , $P_n = 0$.Le potentiel séparable ne supporte que l'état (1s) .



FIGURE 3.3 – Densité de probabilité en fonction du temps et de Pz, $P_n = 0$. Le potentiel séparable supporte l'état (1s + 2s).



FIGURE 3.4 – Densité de probabilité en fonction du temps et de Pz, $P_n = 0$. Le potentiel séparable supporte l'état (1s + 2s + 2p).

En observant cette densité, On remarque des oscillations qui sont périodiques et en oppositions de phase avec le potentiel. Ces Observations faites sont caractéristiques du régime basse fréquence et ont un intérêt particulier car permettent de définir le régime tunnel. D'après des observations faites sur la figure (3.1), après environ deux cycles, on commence à observer les stries verticales qui maintiennent leurs positions fixes. Ces stries apparaissent comme la manifestation instantanée de l'ionisation. En considérant le modèle du potentiel séparable, on observe sur la figure (3.2) l'apparition des stries pour une faible valeur de la composante Pz. Lorsqu'on considère le cas où le potentiel supporte l'état (1s+2s), sur la figure (3.3) on observe graduellement la bande de stries dans les alentours de faible P_z . En considérant le cas où le potentiel supporte l'état (1s+2s+2p) on remarque sur la figure (3.4) qu'il ya d'avantage des stries . La densité de probabilité obtenue en utilisant Le potentiel séparable qui supporte l'état (1s+2s+2p) converge vers celle représentée sur la figure (3.1).

3.3 Densité de probabilité d'ionisation en fonction de P_Z

La figure (3.5) représente la densité de probabilité d'ionisation $|\Phi(p_n = 0, Pz, t = T_P)|^2$ en fonction de P_Z obtenue à la fin de l'interaction en utilisant le potentiel exact obtenu de la résolution l'ESDT. Cette densité de probabilité d'ionisation est tirée de [3]. Les figures (3.6),(3.7),(3.8) représentent les densités de probabilités d'ionisation pour les potentiels supportant les états (1s),(1s+2s),(1s+2s+2p)respectivement.



FIGURE 3.5 – Densité de probabilité d'ionisation $|\Phi(P_n = 0, Pz, t)|^2$ en fonction de Pz obtenue à la fin de l'interaction en utilisant le potentiel exact obtenu de la résolution de l'ESDT.



FIGURE 3.6 – Densité de probabilité d'ionisation $|\Phi(P_n = 0, Pz, t)|^2$ en fonction de Pz obtenue à la fin de l'interaction en utilisant le potentiel supportant l'état (1s).Les caractéristiques de l'impulsion laser sont sur la figure.



FIGURE 3.7 – Densité de probabilité d'ionisation $|\Phi(P_n = 0, Pz, t)|^2$ en fonction de Pz obtenue à la fin de l'interaction en utilisant le potentiel supportant l'état (1s + 2s).Les caractéristiques de l'impulsion laser sont sur la figure .



FIGURE 3.8 – Densité de probabilité d'ionisation $|\Phi(P_n = 0, Pz, t)|^2$ en fonction de Pz obtenue à la fin de l'interaction en utilisant le potentiel supportant l'état (1s + 2s + 2p). Les caractéristiques de l'impulsion laser sont sur la figure.

Comme le potentiel pondéromoteur prend la valeur $U_p = 0,285u.a$, le paramètre de Keldysh prend la valeur $\gamma = 0,937$, avec cette valeur de l'intensité, on peut conclure qu'on est dans le cas du régime intermédiaire. La densité $|\Phi ion(p_n =$ $0, Pz, T_P)|^2$ représente l'émission des électrons vers l'arrière (pz < 0) et également l'émission des électrons vers l'avant (pz > 0). Sur les figures(3.5), (3.6), (3.7), (3.8), Nous avons représenté , la distribution de la densité de probabilité d'ionisation en fonction de l'énergie de l'électron pour le potentiel exact et le potentiel séparable, lequel supporttant l'état (1s), l'état (1s+2s) et l'état (1s+2s+2p) respectivement. Les lignes verticales en pointillées indiquent les valeurs de P_Z correspondant à $2U_P$ et à $10U_p$. Nous faisons une comparaison entre la figure (3.5) qui est obtenue en utilisant le potentiel exact issue de la résolution numérique de l'équation de Schrödinger et la figure (3.8) qui est obtenue en utilisant la méthode du potentiel modèle lorsque le potentiel supporte l'état (1s + 2s + 2p).Dans ce cas particulier, le laser a une intensité $I = 1, 3 \times 10^{14} w/cm^2$. Le choix de ce cas spécifique est intéressant parce qu'il pose un problème cruciale qui est celui de l'approximation du champ fort. Pour cette valeur considérée de la fréquence du laser, le paramètre de Keldish $\gamma = 0,937$. A ce niveau, le critère du champ fort n'est plus applicable. A priori, on est dans un régime intermédiaire où l'ionisation multiphonique et l'ionisation tunnel coexiste. Les résultats obtenus laissent observer certains comportements :

(1)-l'électron est préférentiellement émit le long du vecteur de polarisation. Malgré le fait que les différents états lies et les états du continuum sont pris en compte pour chaque paquet d'onde, la second structure obtenue au dessus de $(2U_P)$ est qualitativement en concordance avec celui correspondant au potentiel exact de coulomb.

(2)-On observe en plus sur le graphe l'existence des pics qui sont séparés les uns après les autres par l'énergie du photon w.

Cependant il existe certain désaccord. En dessous de $(2U_P)$ les résultats obtenues avec la résolution de l'équation de schrödinger est Sous estimé par le modèle du potentiel supportant l'état (1s) et l'état (1s+2s) et surestimé par le modèle du potentiel supportant l'état (1s+2s+2p) en comparaison avec le potentiel de coulomb éxact. D'une manière générale la différence majeure avec le potentiel de coulomb est l'absence de plusieurs états excités inclus dans notre potentiel et donc la description approximative du continuum. Une autre différence importante concernant la décroissance de l'amplitude du pic central est la valeur de la probabilité d'ionisation. En fait, dans les travaux de Armel de Bohan [3], pour une impulsion laser d'intensité $I=1, 3 \times 10^{14} w/cm^2$, il a obtenu la probabilité d'ionisation d'environ 14 % tandis que pour le modèle du potentiel supportant l'état 1s on obtient une valeur de moins de 1% .Lorsque le potentiel supporte l'état (1s+2s+2p) on trouve une probabilité d'ionisation d'environ 2,5%.

3.4 Population des états discrets : oscillations de Rabi

Dans cette section on étudie la variation des populations du fondamental (1s) et de l'état excité (2p) de l'atome lorsque celui-ci est en résonnance due à l'amplitude du champ laser $\xi_0 = 0,038u.a$ correspondant à l'intensité du champ $I=5 \times 10^{13} W/cm^2$ [11]. Sur la figure (3.9) ci-dessous nous avons la variation de la population de l'état fondamentale 1s et de l'état excité 2p en fonction du temps.



FIGURE 3.9 – Population de l'état lié pour une impulsion laser de 30 Cycle optique avec une intensité $I=5 \times 10^{13} w/cm^{-2}$ à la fréquence de résonance W=0,375u.a.

Sur cette figure, le trait gris en interrompus représente la variation de la population de l'état 1s donner par l'ESDT et le trait noir en interrompu représente la variation de la population de l'état 1s donné par le potentiel model. Egalement le trait gris continu représente la variation de la population pour l'état 2p donné par l'ESDT et le trait continu en noir représente la variation de la population de l'état 2p donné par le potentiel model. Il est à noter que notre potentiel séparable supporte les états (1s + 2s + 2p).Pour cette fréquence de résonance W=0,375u.a.on observe des oscillations de rabbi c'est à dire les états 1s et 2p oscillant en opposition de phase.Les résultats du potentiel exact et du potentiel séparable sont qualitativements identiques et chibent une légère difference quantitative vers la fin de l'interaction.Cette difference se comprend par le manque des états liés supérieures dans le potentiel modèle.

3.5 Conclusion

Dans ce chapitre consacré à la présentation numérique des résultats il était question de présenter les résultats obtenus par la résolution de l'ESDT. Nous avons utilisé l'approche de la résolution dans l'espace des moments en faisant usage du modèle du potentiel séparable. Grace à cette approche, nous avons reproduit quelques les résultats théoriques et avons fait une analyse de la dynamique d'ionisation à partir de ces résultats. A partir de ces résultats également nous avons tiré la conclusion que l'espace des moments, contrairement à l'espace des positions est un espace privilégié pour l'étude de la dynamique d'ionisation. Ces résultats nous ont permis en plus de dégager des interprétations permettant de mettre en exergue le rôle joué par le potentiel coulombien. D'autre part, la présence des stries qui apparaissent comme la manifestation instantanée de l'ionisation s'est révélée utile car elles permettent de savoir que la densité de probabilité reste localisée durant toute l'interaction permettant ainsi le contrôle de la dynamique d'ionisation pendant toute la durée de l'interaction .Ce chapitre a aussi permis de mettre en évidence la variation de la population des états discrets.

IMPLICATION DU SUJET SUR LE SYSTEME EDUCATIF

4.1 Introduction

La formation de l'élite enseignante au Cameroun est achevée par une soutenance de mémoire portant sur un sujet d'étude quelconque, propre à chaque filière de formation. Le sujet traité doit en outre refléter les aspects pédagogique et didactique en relations avec le cursus de formation. Dans ce chapitre nous allons présenter une fiche pédagogique qui fait le lien entre la recherche menée et le métier d'enseignant du secondaire pour lequel nous avons reçu une formation. Par la suite nous allons montrer l'intérêt didactique du sujet

4.2 Fiche pédagogique

Nous avons conçu une fiche pédagogique comprenant un ensemble de questionnement portant sur l'ionisation d'un atome d'hydrogène. Cette fiche permettra à un élève de la classe de terminale C ou D d'avoir une connaissance large sur la notion des niveaux d'énergie d'un atome d'hydrogène. L'atome d'hydrogène est la plus simple des atomes.

Quelle est la représentation symbolique de l'hydrogène?

Réponse : 1_1H .

Combiens d'électrons possède l'atome d'hydrogène?

Réponse : 1 électron

La formule donnant le niveau d'énergie d'un atome est donné par $E_n = \frac{E_0}{n^2}$.

Pour n = 1 comment appel t'on cet état?

Réponse : cet état est l'état fondamental.

Pour n > 1 , comment appel cet et at ?

Réponse : Cet état est l'état excité.

Quel phénomène va se produire si $n{=}\infty$

Réponse : l'énergie $E_n = 0.$ dans ce cas on dit que l'atome est a l'infinie.

Qu'-est-ce qui deplace l'atome pour l'amener a l'infinie?

Réponse : lorsque l'atome se trouve dans un champ électrique ou magnétique de fréquence convenable .

Qu'appel t'on énergie d'ionisation?

Réponse : c'est l'énergie qu'il faut fournir a l'atome pour renvoyer son électron a l'infini.

Quels sont les objectifs de la recherche sur l'ionisation des atomes?

Réponse : c'est dans l'optique de découvrir des nouveaux domaines d'application afin de mieux l'utiliser pour améliorer les conditions de vie de l'homme.

Exercice

les niveaux d'énergie quantifiés de l'atome d'dhydrogène

sont données par la relation $E_n = \frac{-13.6}{n^2}$. Avec E_n en eV ET n , le nombre quantique principal .

on eclaire l'atome d'hydrogène avec un Laser de fréquence convenable.

1- Qu'appelle t-on niveau d'énergie quantifiée?

Réponse : on appel niveau d'énergie ,les niveaux d'énergies qui prènnent des valeurs

précises et discretes.

2- Quelle est l'énergie d'ionisation d'un atome de H?

Réponse : l'énergie d'ionisation de l'hydrogène est 13,6 eV.

3-Quelle est l'énergie cinétique minimale d'un électron capable de provoquer l'excitation d'un atome d'hydrogène de son niveau n=1 à son premier niveau excité n=2?

$$E_n = \frac{-E_0}{n^2}, E_P = \frac{E_0}{P^2}$$
(4.1)

Réponse : on trouve que l'energie cinetique a pour valeur donnée par : $E_C = 10, 2eV$ 4- L'atome précédemment H excité revient à l'état fondamental n = 1 avec émission d'une onde lumineuse . Quelle est sa longueur d'onde ? Réponse : par définition nous avons :

$$\Delta E = \frac{hC}{\lambda} \equiv > \lambda = \frac{hC}{\Delta E} \cdot n = 1, P = 2et\lambda = 122nm$$
(4.2)

5- Etablir la rélation littérale donnant la fréquence des ondes lumineuses lorsqu'un atome H préalablement excité passe d'un niveau d'énergie n > 2 à un niveau d'énergie n=2.Calculer la plus grande longueur d'onde des ondes émises dans ce cas.

Réponse : Rélation litterale donnant la fréquence des ondes lumineuses lorsqu'un atome H préalablement excité passe d'un niv eau d'énergie n> 2 à un niveau n=2 Pour n=2 on a $E_2 = \frac{-E_0}{2^2} = \frac{-E_0}{4}$ Pour n=P > 2 on a $E_P = \frac{-E_0}{P^2}$

$$\nu = \frac{E_0}{h} \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{P^2}\right) \tag{4.3}$$

Calcul de la longueur d'onde la plus grande

$$\lambda_{max} = \frac{36hC}{5E_0} \tag{4.4}$$

4.3 Intérêt didactique

Cet intérêt peut se retrouver à plusieurs niveaux de la vie courante :

4.3.1 Physique chimie

-travail sur les atomes et la compréhension de l'effet photo électrique.

-Facilite la compréhension du fonctionnement des plaques photovoltaïques.

-Facilite la comprehension du phénomène d'apsortion de certain rayonnement par un certain nombre de substance.

-Facilite la compréhension du phénomène d'apsortion et d'émission du rayonnement.

4.3.2 Technologie

-Progrès techniques et inventions.

-Réalisation du projet technique.

-Travail détaillé sur les différents atomes.

- conception et mise en fonctionement des plaques photovoltaïque

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

Ce travail a porté sur l'étude théorique de l'ionisation de l'hydrogène atomique en champ laser intense par une approche quasi-analytique dans l'espace des moments. Il a été question de comprendre le rôle que joue le potentiel coulombien dans la dynamique d'ionisation. Dans le premier chapitre de ce travail, nous avons décrit de manière détaillée les différents processus atomiques qui peuvent se produire lorsqu'un système atomique interagit avec un champ laser de fréquence convenable. Il ressort de ce chapitre qu'il existe deux processus non linéaires susceptibles de se produire dans l'atome en présence d'un champ Laser intense à savoir l'ionisation et la génération d'harmonique d'ordre élevé. Cependant, nous nous sommes intéressés tout simplement à l'ionisation et avons remarqué qu'elle pouvait se produire par deux canaux : l'ionisation multi phonique et l'ionisation par effet tunnel. Dans le deuxième chapitre, il était question de résoudre l'ESDT. Cette résolution a été faite en utilisant la méthode du potentiel séparable introduite par H. M. Tetchou Nganso 4. Ce modèle consiste à remplacer le noyau non local par une somme finie de N potentiels séparables où chacun supporte un état lié de l'atome d'hydrogène. Cette approche a permis de ramener l'ESDT tridimensionnelle à un système d'équation linéaire de voltera de 2^{nde} espèce dont les techniques de résolutions sont abondantes dans la littérature. Le succès de cette précieuse méthode de résolution nous a permis de retenir plusieurs avantages lies à ce modèle du potentiel séparable. Nous pouvons

citer entre autre la bonne description du paquet d'onde de l'électron; l'invariance de la jauge liée à la théorie.

Dans le troisième chapitre réservé à la présentation des résultats numériques ,nous avons présenté et interprété les graphes déduites de nos résultats numériques notamment ceux portant sur la densité de probabilité des électrons émis, de la densité de probabilité d'ionisation et ceux portant sur le peuplement des états. Cette partie s'est révélée très instructive car cela nous a permis non seulement de confirmer le rôle joué par le potentiel coulombien à travers sa portée infinie et aussi surtout de comprendre l'influence significative des états liés autre que le fondamentale (1s) dans les structures des pics ATI à basses énergies inferieures à $2U_P$. Elle nous a également permis de confirmer que l'espace des moments est privilégié pour l'étude de la dynamique d'ionisation. A l'issue de cette partie, nous avons compris que l'espace des moments associé à la forme vitesse de l'interaction offre une visualisation quasiinstantanée du processus. L'apparition des stries ayant des positions constantes sur l'axe Pz en fonction du temps a permis de confirmer que la fonction d'onde reste localisée durant toute la durée de l'interaction

D'une manière générale, nous avons obtenu tout au long de ce travail des résultats tout a fait satisfaisants. Un prolongement de ce travail consistera à développer le potentiel non local $V(\mathbf{p},\mathbf{p'})$ sur plusieurs états excités afin d'avoir des résultats meilleurs que ceux qui ont été trouvés dans notre travail et ainsi les comparer aux résultats expérimentaux.

Bibliographie

- [1] L.V. Keldysh, sov. Phys. JETP 20,1309 (1965).
- [2] M. V. Ammosov, N. V. Delone and V. P. Krainov, Sov. Phys. JETP 64, 1191 (1986)
- [3] A. de Bohan, Dynamique de l'Interaction Laser-Atome. Moment Canonique et Approximation du Champ Fort,PhD Thesis,Université catholique de louvain,belguim(2001).
- [4] H. M. Tetchou Nganso, Ionization Dynamics of a Model Atom Exposed to a Strong Laser Pulse and Relativistic Calculation of Matrix Elements for Two-Photon Transitions in Hydrogen-Like Ions, PhD Thesis, The University of Douala, Cameroon (2011).
- [5] R. Guichard, Excitation et ionisation des atomes d'hydrogène et d'hélium par des impulsions laser femtosecondes : approche théorique par des états de "Coulomb-Volkov".PhD Thesis, Université de Bordeaux, France(2007).
- [6] Abdouraman, Ionisation de l'atome d'hydrogène, Mémoire de Master 2, Université de Douala, Cameroun (2011).
- [7] S.Giraud, Dynamique de l'ionisation de l'atome d'hydrogène par une impulsion laser. Mémoire de Master 2, Université Catholique de Louvain, Belgique (2005) Belgique.

Mémoire de DIPES II * Laboratoire de simulation et de biophysique moléculaire Saha Etienne Dieudonne @ENS 2015-2016

- [8] X. F. Li, A. L'Huilier, M. Ferray, L. A. Lompre and G. Mainfray, Phys. Rev. A 39, 5751 (1989).
- [9] Patrick.J.Randerson,Fundamental Dynamics in High intensity Laser Ionisation,PhD Thesis,The Ohio state university Renewable and sustainable Energy Reviews 2012; 16: 4557-62.
- [10] M. Pont, R. Potvliege, R. Shakeshaft and T. Zhong-jiang, Phys. Rev. A 45, 8235 (1992).
- [11] P. B. Corkum. Plasma perspective on strong field multiphoton ioniza-tion. Phys. Rev. Lett., vol. 71, no. 13, page 1994, 1993.
- [12] Alliou Hamidou. Interaction Laser-atome :nouvelle approches théoriques dépendantes du temps. PhD Thesis, Université Catholique de louvain, Belgique (2002).
- [13] H. M.Tetchou Nganso, Yu. V. Popov, B. Piraux, J. Madronero, and M. G. Kwato Njock, Phys. Rev. A 83, 013401 (2011)
- [14] P.B.Corkum.Plasma perspective on strong field multiphoton ionization.phys.Rev.Lett,Vol.71, no.13,Page 1994,1993.
- [15] S.O.Fatunla, Math.Comp.32,1 (1978)