

國立交通大學

物理研究所

碩士論文

動量空間 Conservation Element and Solution Element 方法研究

Above-Threshold-Ionization

Momentum space Conservation Element and Solution Element Method
study Above-Threshold-Ionization

研究生：張繼允

指導教授：江進福 教授

中華民國 100 年 七月

動量空間 Conservation Element and Solution Element 方法研究

Above-Threshold-Ionization

Momentum space Conservation Element and Solution Element Method

study Above-Threshold-Ionization

研究生：張繼允

Student：Chi-Yun Chang

指導教授：江進福

Advisor：Tsin-Fu Jiang

國立交通大學

物理研究所

碩士論文

1896

A Thesis Submitted to Institute of Physics College Science

National Chiao Tung University in partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master in

Physics

July 2011

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國 100 年七月

動量空間 Conservation Element and Solution Element 方法研究

Above-Threshold-Ionization

學生：張繼允

指導教授：江進福

國立交通大學物理研究所

摘要

這篇論文中將使用 CESE Method 來求解在動量空間(P-space)中的 Time Dependent Schrodinger Equation(TDSE)，並利用簡諧位能加入強雷射脈衝為例子來求出電子從基態躍遷至其他激發態的機率分佈為 Poisson 分佈；以及利用”soft-Coulomb” potential 來模擬 Ar 原子打入強雷射脈衝後所得到的 ATI spectrum，並且重現當雷射強度增加少許後，ATI spectrum 在特定的區域內有劇烈的變化。

致謝

當這篇碩士論文完成時候，我的碩士生生涯就即將結束了，在這一段時間內首先要謝謝的就是我的指導教授江進福江教授了，很感謝他這長時間以來的教導，雖然說過程中，有些地方會因為不了解而做錯而花很久的時間才解決，甚至連長到連我自己都感覺到不太妙的長，不過教授還是一樣耐心的給予我指導與糾正還有叮嚀，真的是很感謝教授不厭其煩的幫我找錯誤；接著要感謝的則是實驗內的諸位學長們，感謝李漢傑學長還有鄭世達學長平常有啥大問題小問題就跑去你們問，直到口試前幾天還撥空來聽我試講，還給了一堆建議，太感謝了！沒有你們搞不好我還不知道口試要準備甚麼以及如何準備才好；接著還有同學以及學弟們我會懷念你們的…，跟你們在吃完中餐後的閒聊時間，一起待在實驗室奮鬥的時間，一起努力為了能口試而互相加油鼓勵；更感謝我爸媽他們兩位給予我的支持，這碩士生涯內的所有事情我會牢牢的記在心裡，其中遇到了許許多多的困難以及瓶頸，但是還是在我的背後支持著我叮嚀著我，這段時間讓你們擔心了，謝謝你們；接著我的表兄弟姐妹們還有我的老弟，真的是謝謝你們各位的幫忙跟支持，這一刻讓你們大家久等了！

目 錄

中文摘要	i
誌謝	Ii
目錄	Iii
圖目錄	iv
一、	緒論.....	1
二、	CESE 模型	
2.1	a-scheme.....	2
2.2	邊界的處理.....	6
三、	量子力學問題	
3.1	打入強雷射脈衝的簡諧振子.....	7
3.2	數值計算結果.....	9
3.3	Above Threshold Ionization(ATI) spectrum.....	13
3.4	初始態問題.....	15
3.5	投影.....	17
3.6	數值計算結果.....	17
四、	結論.....	26
參考資料	27

圖目錄

2.1 以 x 和 t 基底的二維座標空間 E_2	2
2.2 在二維座標空間 E_2 中，空間與時間區塊可被切割.....	3
2.3 解元(Solution element)的定義.....	4
2.4 守恆元(Conservation element)的定義.....	4
2.5 "Ghost cell"的定義.....	6
3.1 簡諧振子受到強雷射脈衝而躍遷的分佈機率圖的數值解與解析解比較 I..	11
3.2 簡諧振子受到強雷射脈衝而躍遷的分佈機率圖的數值解與解析解比較 II..	11
3.3 簡諧振子受到強雷射脈衝而躍遷的分佈機率圖的數值解與解析解比較 III..	12
3.4 簡諧振子受到強雷射脈衝而躍遷的分佈機率圖的數值解與解析解比較 IV..	12
3.5 "Soft-Coulomb"位能.....	13
3.6 "Soft-Coulomb"位能的基態、第一激發態與第二激發態波函數.....	16
3.7 強雷射脈衝的向量勢.....	18
3.8 ATI spectrum.....	19
3.9 ATI 數值解結果 I.....	20
3.10 ATI 數值解結果 II.....	21
3.11 ATI 數值解結果 III.....	22
3.12 結果I到結果III的比較.....	23
3.13 折積數值解與解析解比較 I.....	24
3.14 折積數值解與解析解比較 II.....	25

第一章

緒論

Space-time conservation element and solution element method 我們簡稱為 CESE method 是由 Dr. Sin-Chung Chang 所發展出來的一套數值計算方法，之後再被 Dr. Sin-Chung Chang 以及他的同事們改進與發展，CESE method 他主要的精神在於守恆定理(conservation law)，他將計算的空間(space)與時間(time)切割成許多不互相重疊且大小相同的網格，利用通量(flux)流過每一區塊並遵守守恆定律的關係，而找出網格上每個(mesh point)關係，而我們則可以利用已知 mesh point 值不斷的求出未知的 mesh point，就像爬樓梯一般，一步一步的將未知的 mesh point 求出來。而 CESE method 經常被使用在計算流體力學、航空力學[1]...等領域中偏微分方程(Partial Differential Equations)上，由此可知 CESE method 的實用性已經被大家所接受了。

而現在我們也使用 CESE method 來計算量子力學上的 Time Dependent Schrödinger Equation(TDSE)，但是對於某些量子力學上的某些問題：舉例來說像是散射問題，在物理上，波函數會被散射至遙遠的地方，在數值計算時我們可能就必須將計算的範圍設定的非常大，但是又基於精準度的問題，我們取得格子點也就要相當的精細，因此點數相對的就會非常多，而在模擬計算速度上就會變得相當緩慢，相反的，粗糙的格子點也會讓我們在模擬計算中，因為誤差而遺失掉一些重要的資訊，然而在動量空間中[2]，反而不需擔心這些大麻煩，在動量空間中，動量的大小便關係著動能(Kinetic energy)，所以我們不用擔心有無限大能量的物體存在，所以在動量空間的模擬計算上可以比在 x 空間模擬時保留更多的資訊，因此在計算偏微分方程時，我們將會從原本在計算的 x 空間轉換至動量空間。

第二章

CESE 模型

2.1 A-scheme

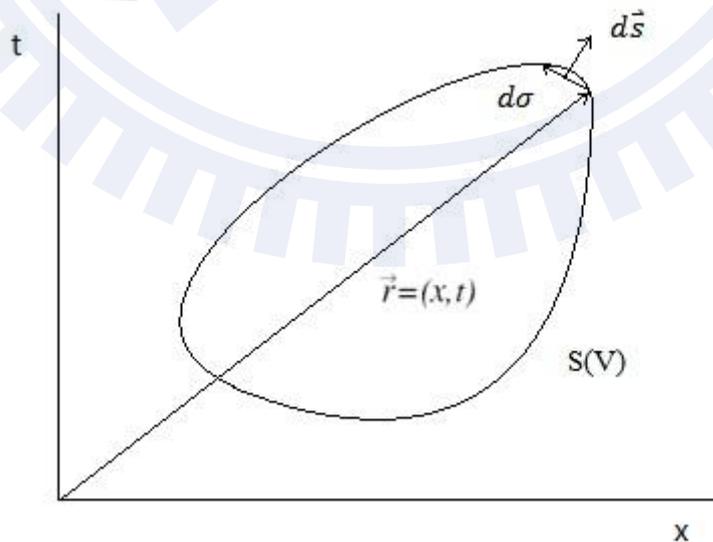
首先一維的 a-scheme[3]，我們考慮下列 PDE

$$\frac{\partial u}{\partial t} + a \frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad (2.1)$$

已知函數 $u(x - at)$ 為 Eq.(2.1) 的通解，其中 a 為波速並且 $a \neq 0$ 為一常數；假設 x 和 t 為二維座標空間裡 E_2 的兩座標軸，如[圖一]中所表示，所以從高斯散度定理(Gauss` divergence theorem)我們可以得到下面式子

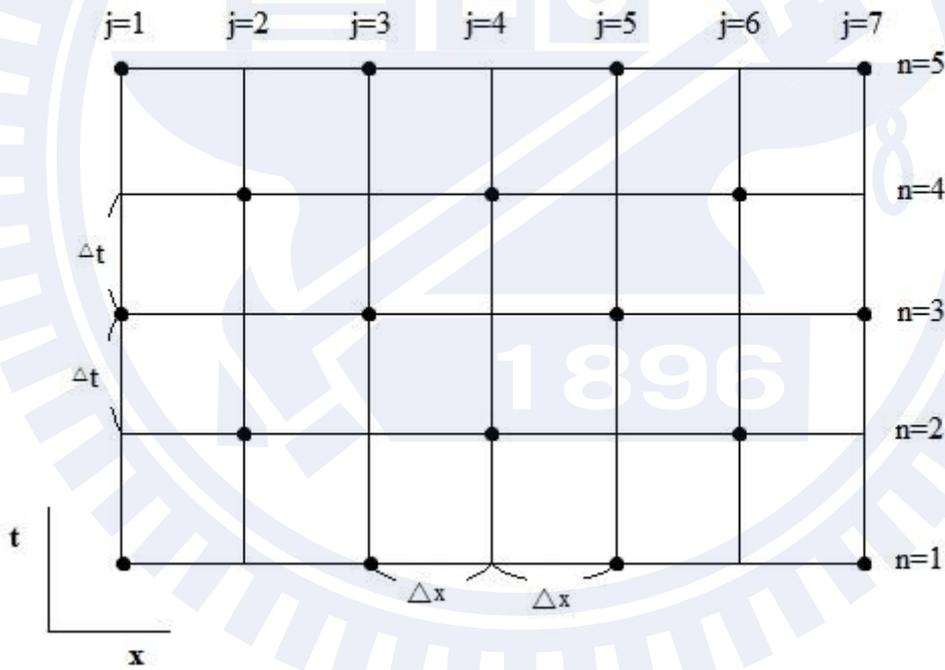
$$\int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{h} \cdot d\tau = \oint_{S(V)} \vec{h} \cdot d\vec{s} \quad (2.2)$$

式子中 $\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial t}\right)$ 、 $\vec{h} = (au, u)$ 、且 $d\vec{s} = \hat{n} \cdot d\sigma$ 。 $S(V)$ 是 x 和 t 在二維座標空間 E_2 的邊界， \hat{n} 是 $d\sigma$ 的單位法向量(unit normal vector)，我們將 \hat{n} 的方向設定為向外。

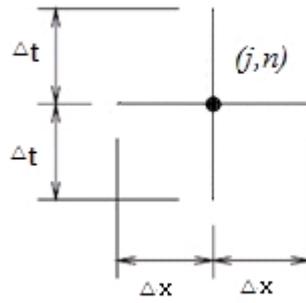


[圖一]：以 x 和 t 為軸的二維座標空間 E_2 。

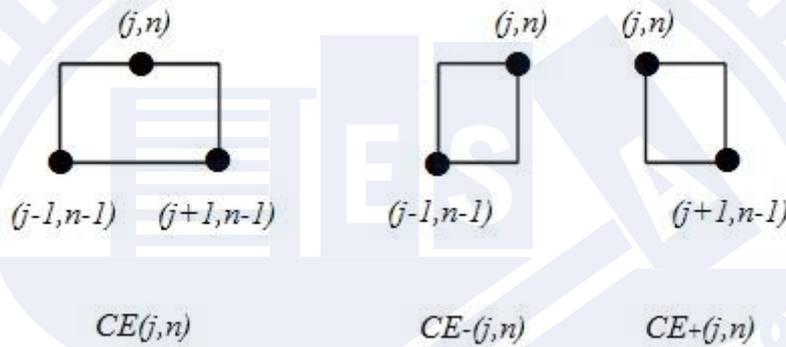
a-scheme 是由許多不重疊的方形區域組合而成如同 [圖二] 所表示，每個方型區域上都會有用黑色塗滿圓圈打上的黑點(mesh point)，每個網點(mesh point)都會有其對應的解元(solution element)，我們簡稱為 $SE(j, n)$ ， $SE(j, n)$ 就像個十字架一樣，它包含了網點本身那點上下左右的水平線以及垂直線 [圖三]，此外每個網點也連結著兩個基本守恆元(basic conservation elements)我們簡稱(BCEs)，而這個BCEs分別為 $CE_+(j, n)$ 以及 $CE_-(j, n)$ ，而這個BCEs會填滿整個在歐基里德空間 E_2 中的空間與時間的區塊，而 $CE(j, n)$ 就是由 $CE_+(j, n)$ 與 $CE_-(j, n)$ 組合而成。由 [圖四] 我們可以清楚的了解。



[圖二]: 在二維座標空間 E_2 中，空間與時間區塊可被切割成如上圖所示的樣子。



[圖三]: 解元(Solution element)的定義就是由包含網點 (j, n) 那點與其上下左右四條線為 $SE(j, n)$ 。



[圖四]: 守恒元(Conservation element)的定義就如上圖所示, $CE_+(j, n)$ 與 $CE_-(j, n)$ 就是整個 $CE(j, n)$, \overline{CB} 和 \overline{CD} 是屬於 $SE(j-1, n-1)$; \overline{AB} 、 \overline{AD} 和 \overline{AF} 屬於 $SE(j, n)$; \overline{ED} 和 \overline{EF} 則屬於 $SE(j+1, n-1)$ 。

因此根據上面的定義, 任何符合 $(x, t) \in SE(j, n)$ 條件下的 $u(x, t)$ 皆可以用以 (x_j, t^n) 作為基點的一階泰勒展開式(1st order of Taylor's expansion)來作近似

$$u(x, t; j, n) \stackrel{\text{def}}{=} u_j^n + (x - x_j) \cdot (u_x)_j^n + (t - t^n) \cdot (u_t)_j^n \quad (2.3)$$

上面的式子中, u_j^n 、 $(u_x)_j^n$ 與 $(u_t)_j^n$ 代表的是 $u(x, t)$ 、 $\frac{\partial u(x, t)}{\partial x}$ 與 $\frac{\partial u(x, t)}{\partial t}$ 在點 (x_j, t^n) 上的數值, 所以 u_j^n 、 $(u_x)_j^n$ 與 $(u_t)_j^n$ 在 $SE(j, n)$ 上都是常數, 因此在符合 $(x, t) \in SE(j, n)$ 條件下, 我們將 $u(x, t; j, n)$ 代入 Eq.(2.1)中, 便可以得知

$$(u_t)_j^n = -a \cdot (u_x)_j^n \quad (2.4)$$

我們將上列關係代入到 Eq.(2.3)中，Eq.(2.3)就可以改寫成下式

$$u(x, t; j, n) = u_j^n + [(x - x_j) - a \cdot (t - t^n)] \cdot (u_x)_j^n \quad (2.5)$$

如同 Eq.(2.3)一樣，在 $(x, t) \in SE(j, n)$ 的情況下， u_j^n 與 $(u_x)_j^n$ 皆為一常數，也因此

在 $(x, t) \in SE(j, n)$ 時候我們也可以將 $\vec{h} = (au, u)$ 表示成下列式子

$$\vec{h}(x, t; j, n) = (au(x, t; j, n), x(x, t; j, n)) \quad (2.6)$$

因此 \vec{h} 流經過 $CE(j, n)$ 的通量可寫成

$$F_{\pm}(j, n) = \oint_{S(CE_{\pm}(j, n))} \vec{h} \cdot d\vec{s} \quad (2.7)$$

從 Eq.(2.2)我們又可以得知

$$F_{\pm}(j, n) = \oint_{S(CE_{\pm}(j, n))} \vec{h} \cdot d\vec{s} = \int_{CE_{\pm}(j, n)} \vec{\nabla} \cdot \vec{h} \cdot d\tau = 0 \quad (2.8)$$

上式中 \vec{h} 在 $CE_{\pm}(j, n)$ 中作封閉線積分，且因為 $d\vec{s} = \hat{n} \cdot d\sigma$ ，我們可以從[圖四]

中得到：在 $CE_{-}(j, n)$ 的線積分時，積分的路徑為 $\overline{AD}, \overline{AE}, \overline{BE}$ 與 \overline{BD} ，其相對應的

單位法向量(unit normal vector)為 $(0, 1), (0, 1), (-1, 0)$ 與 $(0, -1)$ ；而在 $CE_{+}(j, n)$ 時，

其積分的路徑為 $\overline{AD}, \overline{AF}, \overline{CF}$ 與 \overline{CD} ，其互相對應的單位法向量為 $(-0, 1), (0, 1), (1, 0)$

與 $(0, -1)$ 。所以 Eq. (2.6) 經過整理之後可以得到下列式子，也就是 a-scheme 的

核心

$$(1 \mp v)[u \pm (1 \pm v) \frac{\Delta x}{2} (u_x)]_j^n = (1 \mp v)[u \mp (1 \pm v) \frac{\Delta x}{2} (u_x)]_{j\pm 1}^{n-1} \quad (2.9)$$

式子中 $v = a \frac{\Delta t}{\Delta x}$ ，在這裡我們要求 $1 - v \neq 0$ 與 $1 + v \neq 0$ ，所以 Eq. (2.7) 可以

簡化成

$$[u \pm (1 \pm v) \frac{\Delta x}{2} (u_x)]_j^n = [u \mp (1 \pm v) \frac{\Delta x}{2} (u_x)]_{j\pm 1}^{n-1} \quad (2.10)$$

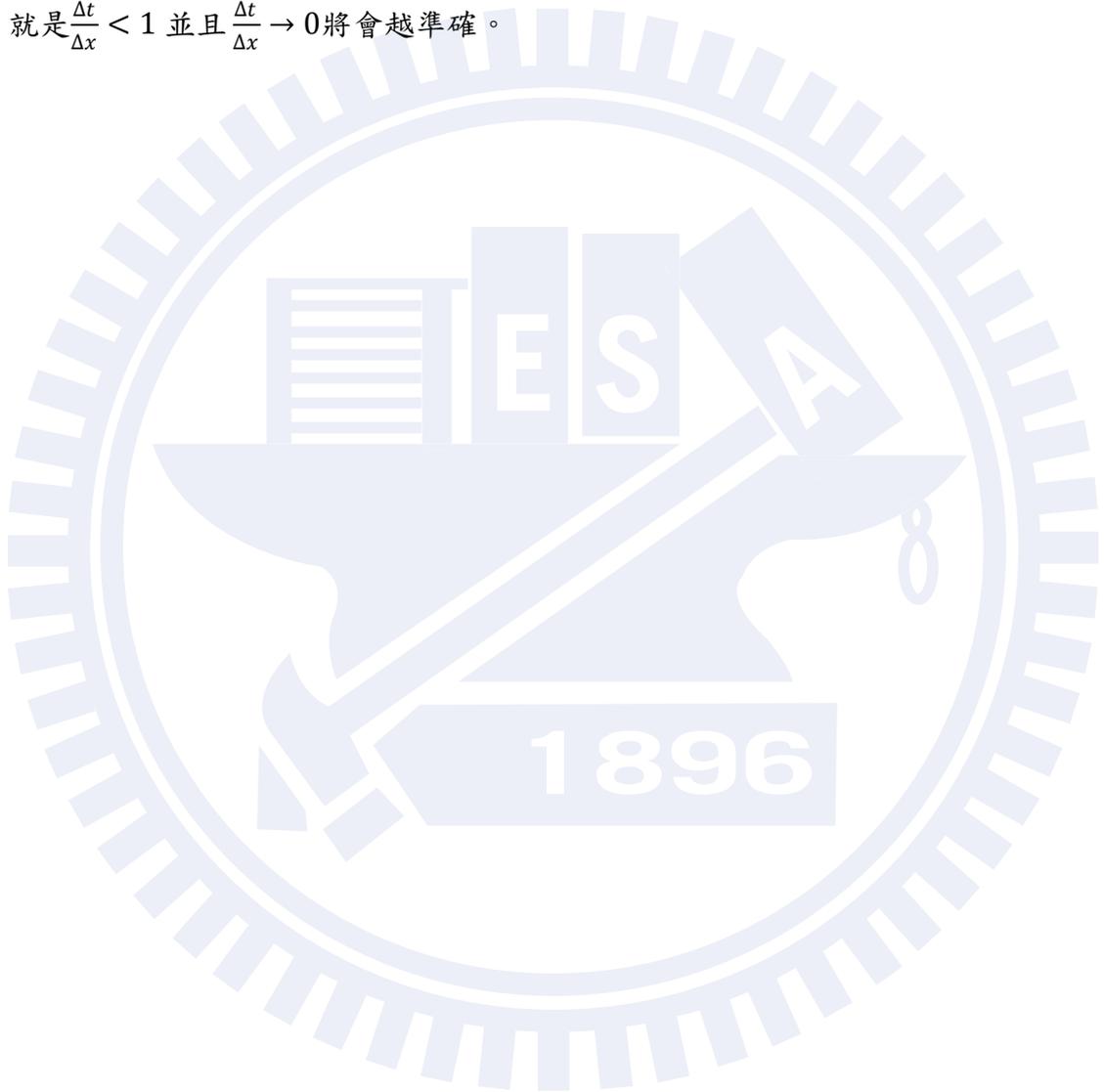
上面的式子中， $u_{j\pm 1}^{n-1}$ 與 $u_{x_{j\pm 1}}^{n-1}$ 皆為已知數，因此 Eq.(2.8) 實際是可以看成是一個

二元一次聯立方程式，我們將上面兩個式子作聯立求解 u_j^n 與 $u_{x_j}^n$ ，便可以得到

$$u_j^n = \frac{1}{2} \left\{ [(1-v)u - (1-v)\frac{\Delta x}{2}(u_x)]_{j+1}^{n-1} + [(1+v)u + (1-v)\frac{\Delta x}{2}(u_x)]_{j-1}^{n-1} \right\} \quad (2.11)$$

$$(u_x)_j^n = \frac{1}{\Delta x(1-v)} \left\{ [(1-v)u - (1-v)\frac{\Delta x}{2}(u_x)]_{j+1}^{n-1} - [(1+v)u + (1-v)\frac{\Delta x}{2}(u_x)]_{j-1}^{n-1} \right\} \quad (2.12)$$

根據上列式子我們知道了 u_j^n 與 $u_{j\pm 1}^{n-1}$ 還有 u_x^n 與 u_x^{n-1} 的關係，就利用上面兩式不斷的求得 $n+1$ 就像爬樓梯一樣的不斷走到最後，我們有件事情必須要注意的，那就是 $\frac{\Delta t}{\Delta x} < 1$ 並且 $\frac{\Delta t}{\Delta x} \rightarrow 0$ 將會越準確。



第三章

量子力學問題

3.1 打入強雷射脈衝的簡諧振子

在這一章節裡，我們將考慮一維的簡諧振子(Simple Harmonic Oscillator)在強雷射脈衝(intense laser pulse)下使用 CESE method 來計算 TDSE 間接模擬從基態(ground state)躍遷至每激發態(excited state)的機率分布圖。

其 TDSE 為

$$i \frac{\partial u}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} \Omega^2 x^2 + i \frac{\partial}{\partial x} \cdot A(t) \right] u \quad (3.1)$$

在這裡我們皆使用 atomic unit，因此 $\hbar = 1, m = 1$ ，因為電磁場與向量勢(vector potential)的關係為

$$E(t) = -\frac{\partial A(t)}{\partial t} \quad (3.2)$$

我們將 Eq. (2.1) 作傅立葉轉換(Fourier Transformation)

$$i\tilde{u}_t + \frac{1}{2}\Omega^2\tilde{u}_{pp} = \left[\frac{p^2}{2} + q \cdot A(t) \cdot p \right] \tilde{u} \quad (3.3)$$

接著如 a-scheme 一樣我們假設 $\vec{h} = (\frac{1}{2}\Omega^2\tilde{u}_p, i\tilde{u})$ ，因此上式可以改寫成

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{h} = \left[\frac{p^2}{2} + q \cdot A(t) \cdot p \right] \tilde{u} \quad (3.4)$$

上式的等號右邊我們稱之為 source term，接著根據高斯散度定理(Gauss's divergence theorem)我們得到

$$\int_V \nabla \cdot \vec{h} d\tau = \oint_{S(V)} \vec{h} \cdot d\vec{s} = \int_V \left[\frac{p^2}{2} + q \cdot A(t) \cdot p \right] \tilde{u} d\tau \quad (3.5)$$

並且我們假設當 $(p, t) \in SE(j, n)$ 時， $\tilde{u} = \tilde{u}(p, t; j, n)$ 並且滿足 Eq.(3.3)，所以 \vec{h} 可

改寫成

$$\vec{h}(p, t; j, n) = \left(\frac{1}{2}\Omega^2\tilde{u}_p(p, t; j, n), i\tilde{u}(p, t; j, n)\right) \quad (3.6)$$

從 Eq. (3.5)我們便可以得到 \vec{h} 通過 $CE(j, n)$ 的通量為

$$\int_{CE_{\pm}(j, n)} \nabla \cdot \vec{h} d\tau = \oint_{S(CE_{\pm}(j, n))} \vec{h} \cdot d\vec{s} = \int_{CE_{\pm}(j, n)} \left[\frac{p^2}{2} + q \cdot A(t) \cdot p\right] \tilde{u} d\tau \quad (3.7)$$

得到上面式子之後，經過與 a-scheme 一樣的計算與解聯立方程之後，我們便可以得到下列兩式子

$$\begin{aligned} \tilde{u}_j^n &= \frac{1}{2} \left\{ \left[\tilde{u} - \left(\frac{\Delta p}{2} - \frac{i\Omega^2\Delta t}{\Delta p}\right)\tilde{u}_p \right]_{j+1}^{n-1} + \left[\tilde{u} + \left(\frac{\Delta p}{2} - \frac{i\Omega^2\Delta t}{\Delta p}\right)\tilde{u}_p \right]_{j-1}^{n-1} + \left(\frac{F}{\Delta p} + \frac{G}{\Delta p}\right) \right\} \quad (3.8) \\ \tilde{u}_{p_j}^n &= \frac{1}{2\left(\frac{\Delta p}{2} - \frac{i\Omega^2\Delta t}{\Delta p}\right)} \left\{ \left[\tilde{u} - \left(\frac{\Delta p}{2} - \frac{i\Omega^2\Delta t}{\Delta p}\right)\tilde{u}_p \right]_{j+1}^{n-1} - \left[\tilde{u} + \left(\frac{\Delta p}{2} - \frac{i\Omega^2\Delta t}{\Delta p}\right)\tilde{u}_p \right]_{j-1}^{n-1} \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{F}{\Delta p} - \frac{G}{\Delta p}\right) \right\} \quad (3.9) \end{aligned}$$

式子中的 F 與 G ，分別是 source term 對 $CE_+(j, n)$ 與 $CE_-(j, n)$ 的體積分，可寫成下列式子

$$F = -i \iint_{CE_+(j, n)} \left[\frac{p_j^2}{2} \cdot \tilde{u}(p, t; j, n) - A(t) \cdot p \cdot \tilde{u}(p, t; j, n) \right] dp dt \quad (3.10)$$

$$G = -i \iint_{CE_-(j, n)} \left[\frac{p_j^2}{2} \cdot \tilde{u}(p, t; j, n) - A(t) \cdot p \cdot \tilde{u}(p, t; j, n) \right] dp dt \quad (3.11)$$

在計算的過程中，在遇到特定的 j 時， $\tilde{u}(p, t; j, n)$ 與 p 會超過我們在動量空間定義的邊界，這時候我們只要令他為等於“零”即可，根據前章節 a-scheme 所描述：

Eq. (1.3) 中的 $(u_t)_j^n$ 我們可從 Eq. (2.3) 令成 $(\tilde{u}_t)_j^n = \left[\frac{p_j^2}{2} + q \cdot A(t^n) \cdot p_j \right] \tilde{u}_j^n -$

$\frac{1}{2}\Omega^2\tilde{u}_{pp_j}^n$ 其中 $\tilde{u}_{pp_j}^n = 0$ ，因為我們只使用一階泰勒展開式，但是這樣其實是錯

的，我們將 $(\tilde{u}_t)_j^n = 0$ ，但是我們為了讓所求出來的數值更加精確，這裡我們將

使用 iteration 來加強我們的精確性，方法就是不斷更新我們的 source term 來做計

算，以下我們用程式來做清楚的說明

$$\tilde{u}_{j,l}^n = \frac{1}{2} \left\{ \left[\tilde{u} - \left(\frac{\Delta p}{2} - \frac{i\Omega^2 \Delta t}{\Delta p} \right) \tilde{u}_p \right]_{j+1}^{n-1} + \left[\tilde{u} + \left(\frac{\Delta p}{2} - \frac{i\Omega^2 \Delta t}{\Delta p} \right) \tilde{u}_p \right]_{j-1}^{n-1} + \left(\frac{F_{l-1}}{\Delta p} + \frac{G_{l-1}}{\Delta p} \right) \right\} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{p_j,l}^n = \frac{1}{2 \left(\frac{\Delta p}{2} - \frac{i\Omega^2 \Delta t}{\Delta p} \right)} & \left\{ \left[\tilde{u} - \left(\frac{\Delta p}{2} - \frac{i\Omega^2 \Delta t}{\Delta p} \right) \tilde{u}_p \right]_{j+1}^{n-1} - \left[\tilde{u} + \left(\frac{\Delta p}{2} - \frac{i\Omega^2 \Delta t}{\Delta p} \right) \tilde{u}_p \right]_{j-1}^{n-1} \right. \\ & \left. + \left(\frac{F_{l-1}}{\Delta p} - \frac{G_{l-1}}{\Delta p} \right) \right\} \end{aligned} \quad (3.13)$$

其中

$$F_{l-1} = -i \iint_{CE_+(j,n)} \left[\frac{p_j^2}{2} \cdot \tilde{u}_{l-1}(p, t; j, n) - A(t) \cdot p \cdot \tilde{u}_{l-1}(p, t; j, n) \right] dp dt \quad (3.14)$$

$$G_{l-1} = -i \iint_{CE_-(j,n)} \left[\frac{p_j^2}{2} \cdot \tilde{u}_{l-1}(p, t; j, n) - A(t) \cdot p \cdot \tilde{u}_{l-1}(p, t; j, n) \right] dp dt \quad (3.15)$$

上式中， F_{l-1} 、 G_{l-1} 與 $\tilde{u}_{l-1}(p, t; j, n)$ 皆為還沒經過疊代之前的數值，也就是 Eq. (2.7)

與 Eq. (2.8)的 \tilde{u}_j^n 與 $\tilde{u}_{p_j}^n$ ，接著令 \tilde{u}_j^n 與 $\tilde{u}_{p_j}^n$ 分別等於 $\tilde{u}_{j,l-1}^n$ 以及 $\tilde{u}_{p_j,l-1}^n$ 代入 Eq. (2.11)

與 Eq. (2.12)再做一次計算，就這樣一直不斷更新 source term 中的 $\tilde{u}_{j,l-1}^n$ 與 $\tilde{u}_{p_j,l-1}^n$

直到 \tilde{u}_j^n 與 $\tilde{u}_{j,l-1}^n$ 收斂為止，而我們使用 Cauchy criterion 來決定是否達到收斂

$$|\tilde{u}_j^n - \tilde{u}_{j,l-1}^n| < \epsilon \quad (3.16)$$

當 $|\tilde{u}_j^n - \tilde{u}_{j,l-1}^n|$ 小於 ϵ 時，iteration 就會停止了。

3.2 數值結果

在動量空間中，一維的簡諧振子在強雷射脈衝的 Schrödinger Equation 可以表示成，其中 $q = -1$

$$i\tilde{u}_t + \frac{1}{2}\Omega^2 \tilde{u}_{pp} = \left[\frac{p^2}{2} - A(t) \cdot p \right] \tilde{u} \quad (3.17)$$

在這章節裡我們將強雷射脈衝設定成

$$E(t) = E_{amp} \sin^2 \left(\frac{\pi t}{T} \right) \sin(\omega t) \quad (3.18)$$

因此從 Eq. (2.2)得知電場與向量勢的關係，所以向量勢可表示為

$$A(t) = \frac{E_{amp}}{2\omega} \sin(\omega t) - \frac{E_{amp}}{4} \left\{ \frac{\sin \left[\left(\omega + \frac{2\pi}{T} \right) t \right]}{\omega + \frac{2\pi}{T}} + \frac{\sin \left[\left(\omega - \frac{2\pi}{T} \right) t \right]}{\omega - \frac{2\pi}{T}} \right\}$$

式子中 E_{amp} 為雷射脈衝的強度(Intensity)； ω 則是雷射脈衝的頻率，我們設定其值為 $0.057 (a.u.)$ (相當於波長 800nm)， T 是雷射脈衝的週期，我們假設 $\Omega = 0.058 (a.u.)$ ，而初始值則是簡諧振子的基態波函數

$$\tilde{u}_1 = \frac{1}{(\Omega\pi)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{p^2}{2\Omega}} \quad (3.20)$$

而從基態 \tilde{u}_1 躍遷至每個激發態 \tilde{u}_n 的機率 $P_{0 \rightarrow N}$ 可寫成下列式子

$$P_{1 \rightarrow N} = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u} \tilde{u}_n dp \right|^2 \quad (3.21)$$

而簡諧振子躍遷至每個激發態的機率分布是為 Poisson 分佈

$$P_{1 \rightarrow N} = e^{-\sigma} \frac{\sigma^N}{N!} \quad (3.22)$$

上式中

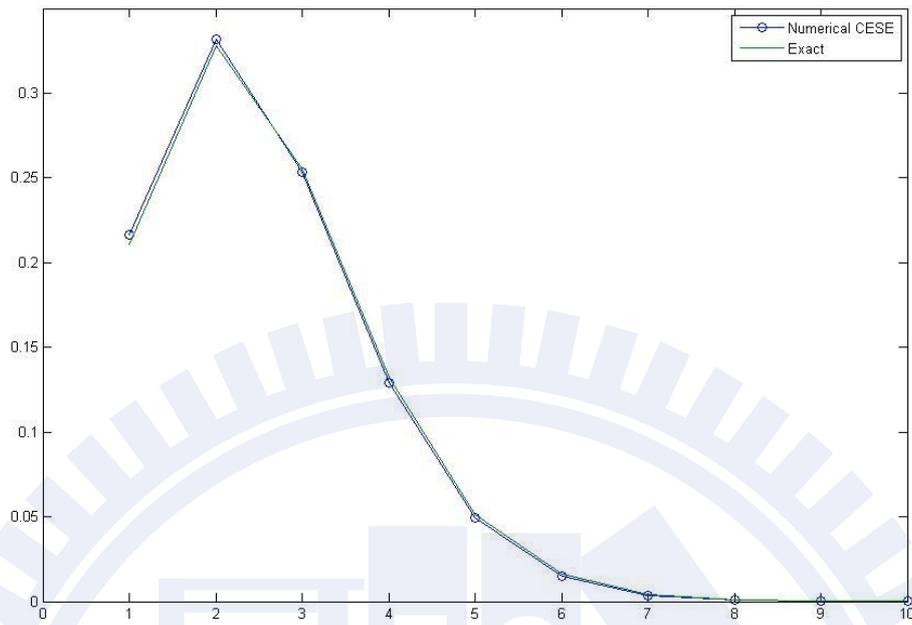
$$\sigma = \frac{1}{2\Omega} \left| \int_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{i\Omega t} \cdot dt \right| \quad (3.23)$$

我們將利用上面式子所計算出來的結果，與利用 CESE method 計算所得到的波函數與所有激發態波函數作投影所得到的 distribution spectrum 互相作比較。

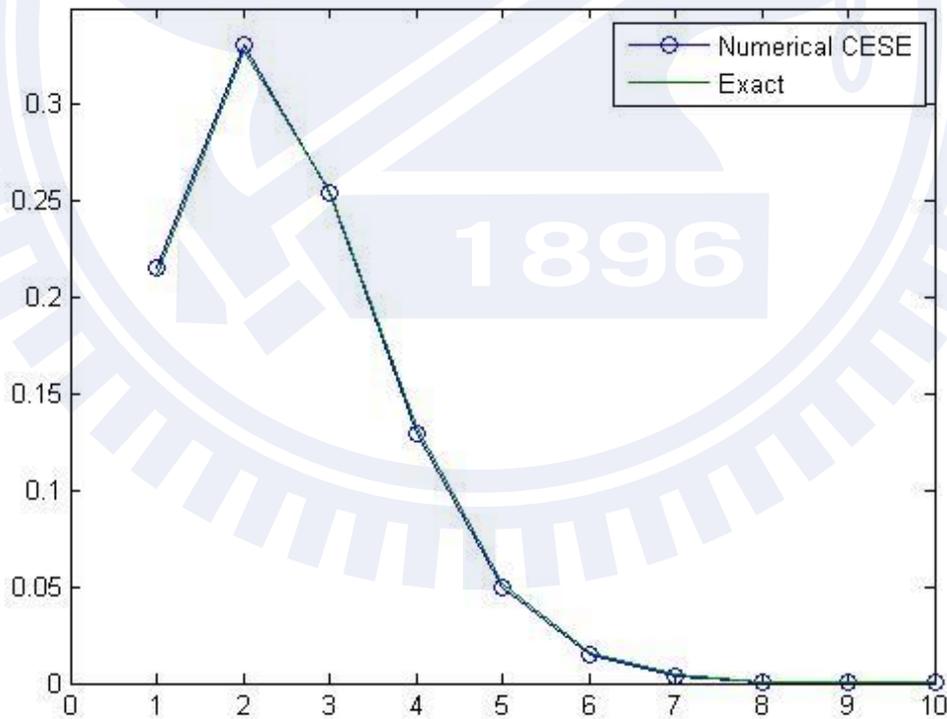
在動量空間的範圍為 -2 到 $+2$ 之間，而強雷射脈衝的周期(T)為 $8 (f.s.)$ 、 $\epsilon = 10^{-7}$ 。最後我們可從 CESE method 得到經過 intense laser pulse 的波函數 $\tilde{\psi}(p)$ ，然後對每個激發態 \tilde{u}_n 作投影，其式子可表達如下

$$Prob(n) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p) \cdot \tilde{u}_n(p) dp \right|^2, \quad n = 1 \rightarrow N \quad (3.24)$$

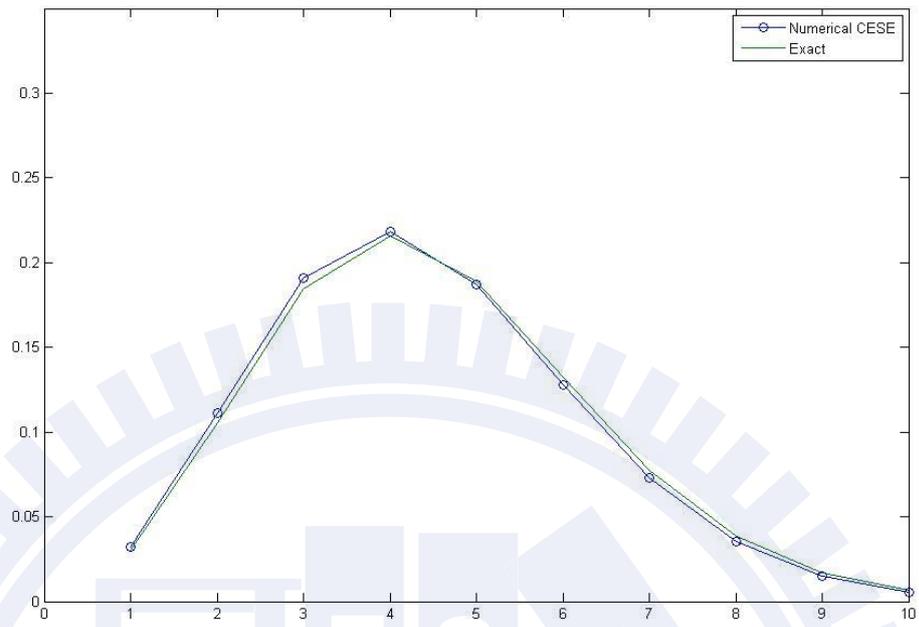
$Prob(n)$ 則是電子在第 n 個能態可能出現的機率，以下我們使用了不同強度(E_{amp}) 以及不同粗細的 grid number 來驗證我們的結果，[圖六]與[圖七]的 $E_{amp} = 0.002$ ，但是[圖七]的格子卻比[圖六]的還要更細密，所以將會看到[圖七]中，CESE 所得出來的曲線與從 Eq. (3.22) 所得到的曲線越吻合。接著我們模擬 $E_{amp} = 0.003$ ，由[圖八]與[圖九]所示，雖然在格子點比較粗糙的時候，CESE method 計算出來的結果與 Eq. (3.22) 所得到的曲線雖然有些微的差別，但是只要將格子點切割得更細密後，與精確解的差別就不會那麼大了。



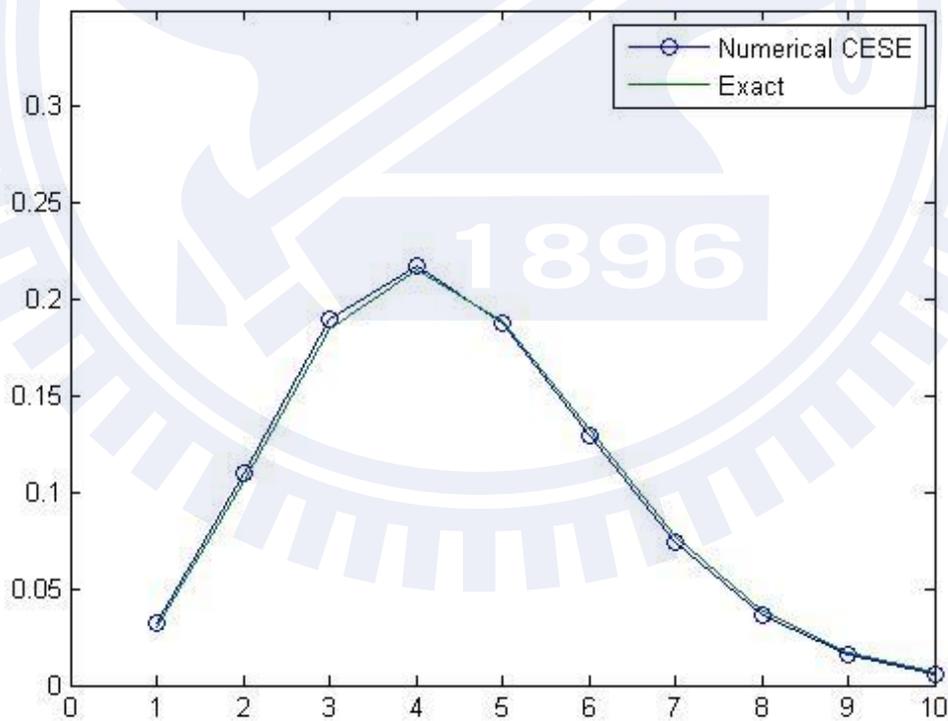
[圖六] : $E_{amp} = 0.002(a.u.)$, $\Delta t = 0.0032$, $\Delta p = 0.008$ 以及 $\epsilon = 10^{-7}$



[圖七] : $E_{amp} = 0.002(a.u.)$, $\Delta t = 0.0016$, $\Delta p = 0.004$ 以及 $\epsilon = 10^{-7}$



[圖八] : $E_{amp} = 0.003(a.u.)$ 、 $\Delta t = 0.0032$ 、 $\Delta p = 0.008$ 以及 $\epsilon = 10^{-7}$



[圖九] : $E_{amp} = 0.003(a.u.)$ 、 $\Delta t = 0.0016$ 、 $\Delta p = 0.004$ 以及 $\epsilon = 10^{-7}$

3.3 Above Threshold Ionization(ATI) spectrum

在這一章節中，我們將討論 Above Threshold Ionization (ATI) spectrum，其 TDSE 可以表示如下

$$i \frac{\partial u}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + i \frac{\partial}{\partial x} \cdot q \cdot A(t) \right] u \quad (3.26)$$

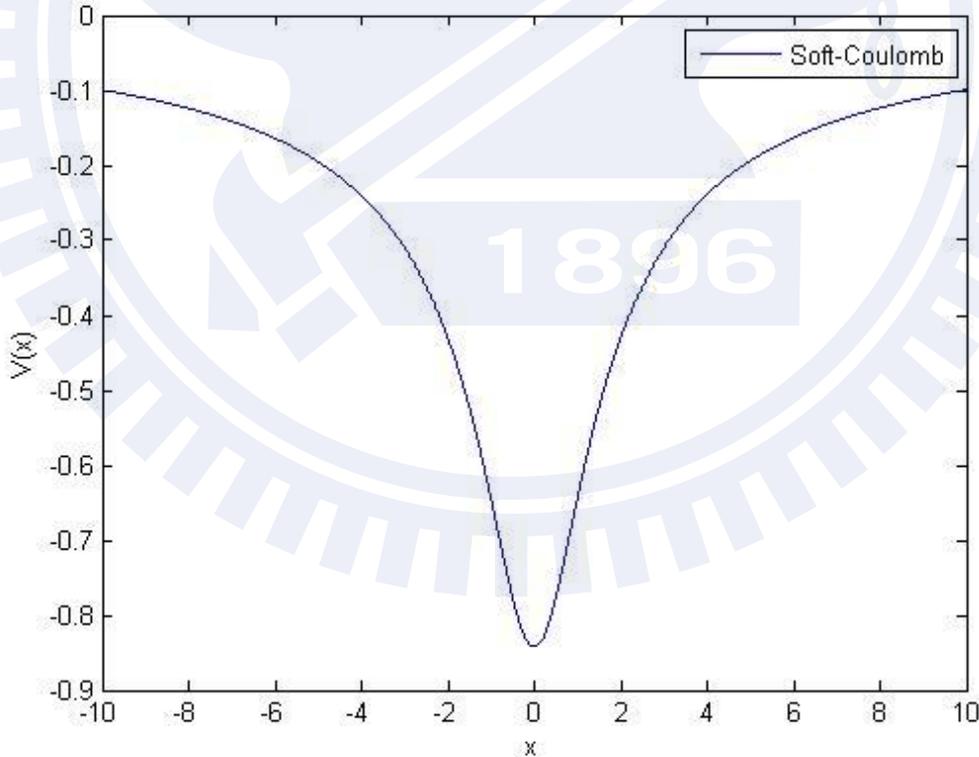
上式中 $V(x)$: 位能(potential)，在這裡我們將使用稱為"soft-Coulomb"[5]位能的函數[圖十]，其定義如下

$$V(x) = -\frac{1}{\sqrt{c - x^2}} \quad (3.27)$$

其中 $c = 1.41$ ，這個稱之為"soft-Coulomb"位能在模擬強場下雷射與原子之間的交互作用時有著卓越的表現，能將其主要的特徵表現出來，並且它的； $A(t)$: 向量勢(vector potential)，從上一章節中我們已經知道電場與向量勢的關係為

$$E(t) = -\frac{\partial A(t)}{\partial t} \quad (3.28)$$

而 q : 電荷(electron charge)。



[圖十]: Soft-Coulomb potential 在當 $|x| \rightarrow \infty$ 時，與一維庫倫位能(1D Coulomb potential)一樣都會趨近於"零"，並且我們能利用此位能來造出無限數量的束縛態。

在這一章，我們將重現 ATI spectrum 裡一個很特別的現象，在實驗裡[6-7]，我們將一到 $I \approx 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 的 intense infrared laser pulse 打入原子中，在我們的理解中，如果我們只有稍稍為改變了強雷射脈衝的強度(Intensity)(約為 1% 左右的變化)，但是被游離出來的光電子(photonelectron)的能量分佈卻在某區間卻有出乎意料的大變化(有 $10 \sim 10^2$ 的差別)，這是相當不可思議的。因此曾經有一段時間許許多多的也有許多論文使用了 Ti:sapphire laser 來嘗試解釋這奇怪的現象[8]，其中有利用"soft-Coulomb" 位能代入 Ar 原子的一維 TDSE 也得可類似的結果。

我們將 Eq. (3.26) 全式作傅立葉轉換(Fourier Transformation)

$$i\tilde{u}_t = \left[\frac{p^2}{2} + q \cdot A(t) \cdot p \right] \tilde{u} + \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(p-q) \tilde{u}(q) dq \quad (3.29)$$

在這裡我們令 $\vec{h} = (0, \tilde{u})$ ，上式則可改寫成

$$\nabla \cdot \vec{h} = -i \left[\frac{p^2}{2} + q \cdot A(t) \cdot p \right] \tilde{u} - i \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(p-q) \tilde{u}(q) dq \quad (3.30)$$

上式的等號右側皆為"source term"，接著根據高斯散度定理(Gauss' divergence theorem)，我們可以得到下列式子

$$\int_V \nabla \cdot \vec{h} d\tau = \oint_{S(V)} \vec{h} \cdot d\vec{s} = -i \int_V \left\{ \left[\frac{p^2}{2} - q \cdot A(t) \cdot p \right] \tilde{u} + \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(p-q) \tilde{u}(q) dq \right\} d\tau \quad (3.32)$$

我們令當 $(p, t) \in SE(j, n)$ 時， $\tilde{u}(p, t) = \tilde{u}(p, t; j, n)$ 並且也滿足 Eq.(5.3)，因此 \vec{h} 就可以寫成

$$\vec{h}(p, t; j, n) = (0, u(p, t; j, n)) \quad (3.32)$$

根據以上的式子，我們便可以定義出 \vec{h} 流通過 $CE(j, n)$ 的通量為

$$\oint_{S(CE_{\pm}(j, n))} \vec{h} \cdot d\vec{s} = -i \int_{CE_{\pm}(j, n)} \left\{ \left[\frac{p^2}{2} + q \cdot A(t) \cdot p \right] \tilde{u} + \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(p-q) \tilde{u}(q) dq \right\} d\tau \quad (3.33)$$

經過計算以及與 a-scheme 一樣的解聯立方程式之後，我們可以得到下列重要的式子

$$\tilde{u}_j^n = \frac{1}{2} \left\{ \left[\tilde{u} - \frac{\Delta p}{2} \tilde{u}_p \right]_{j+1}^{n-1} + \left[\tilde{u} + \frac{\Delta p}{2} \tilde{u}_p \right]_{j-1}^{n-1} + \frac{F}{\Delta p} + \frac{G}{\Delta p} \right\} \quad (3.34)$$

$$\tilde{u}_{p_j}^n = \frac{1}{\Delta p} \left\{ \left[\tilde{u} - \frac{\Delta p}{2} \tilde{u}_p \right]_{j+1}^{n-1} - \left[\tilde{u} + \frac{\Delta p}{2} \tilde{u}_p \right]_{j-1}^{n-1} + \frac{F}{\Delta p} - \frac{G}{\Delta p} \right\} \quad (3.35)$$

上式中， F 與 G 分別是 source term 對 $CE_+(j, n)$ 與 $CE_-(j, n)$ 的體積分

$$F = -i \iint_{CE_+(j,n)} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(p_j - q) \tilde{u}(q) dq + \frac{p_j^2}{2} \tilde{u}(p, t; j, n) - qA(t^n) \tilde{u}(p, t; j, n) \right\} dp dt \quad (3.36)$$

$$G = -i \iint_{CE_-(j,n)} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(p_j - q) \tilde{u}(q) dq + \frac{p_j^2}{2} \tilde{u}(p, t; j, n) - qA(t^n) \tilde{u}(p, t; j, n) \right\} dp dt \quad (3.37)$$

在上列式子之中，在遇到特別的幾個 j 值時， $u(p, t; j, n)$ 將會超出我們在動量空間中所定義的計算範圍，連 $V(p_j - q)$ 也是一摸一樣的，這時我們只要令他等於“零”就可以了，不會有問題；而我們在前一章節中的最後有提到，Eq. (1.3) 在 source term 中時，我們令 $(\tilde{u}_t)_j^n = 0$ ，並且我們也要將 iteration 過程使用在這個問題中，同樣的 iteration 過程也是更新 source term 中的 \tilde{u}_j^n 與 $\tilde{u}_{p_j}^n$

$$\tilde{u}_{j,l-1}^n = \frac{1}{2} \left\{ \left[\tilde{u} - \frac{\Delta p}{2} \tilde{u}_p \right]_{j+1}^{n-1} + \left[\tilde{u} + \frac{\Delta p}{2} \tilde{u}_p \right]_{j-1}^{n-1} + \frac{F_{l-1}}{\Delta p} + \frac{G_{l-1}}{\Delta p} \right\} \quad (3.38)$$

$$\tilde{u}_{p_j,l-1}^n = \frac{1}{\Delta p} \left\{ \left[\tilde{u} - \frac{\Delta p}{2} \tilde{u}_p \right]_{j+1}^{n-1} - \left[\tilde{u} + \frac{\Delta p}{2} \tilde{u}_p \right]_{j-1}^{n-1} + \frac{F_{l-1}}{\Delta p} - \frac{G_{l-1}}{\Delta p} \right\} \quad (3.39)$$

上式中的 F_{l-1} 與 G_{l-1} 則是

$$F_{l-1} = -i \iint_{CE_+(j,n)} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(p_j - q) \tilde{u}_{l-1}(q) dq + \frac{p_j^2}{2} \tilde{u}_{l-1}(p, t; j, n) - qA(t^n) \tilde{u}_{l-1}(p, t; j, n) \right\} dp dt \quad (3.40)$$

$$G_{l-1} = -i \iint_{CE_-(j,n)} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(p_j - q) \tilde{u}_{l-1}(q) dq + \frac{p_j^2}{2} \tilde{u}_{l-1}(p, t; j, n) - qA(t^n) \tilde{u}_{l-1}(p, t; j, n) \right\} dp dt \quad (3.41)$$

而我們也是與上一章一樣使用 Cauchy criterion 來判別 $\tilde{u}_{j,l}^n$ 與 $\tilde{u}_{j,l-1}^n$ 是否收斂，在這裡也就不再多做描述了。

3.4 初始態問題

在使用 CESE method 模擬計算時，都必須要有一個初始態(initial state) 才能讓我們繼續接下去的工作，我們必須得到 $\tilde{u}(p, t = 0, j, n = 1)$ 函數的值才能繼續計算出 $n = 2, 3, 4, \dots$ 的函數值，就 a-scheme 以及簡諧振子(Simple harmonic oscillator)來說，a-scheme 的函數的解析解已經是眾所皆知的 $f(x - at)$ ，然而簡

諧振子的初始態則是他自己本身的基態波函數，在這章節裡，我們需要以“soft-Coulomb” potential 為 $\tilde{V}(p_i)$ 的基態波函數

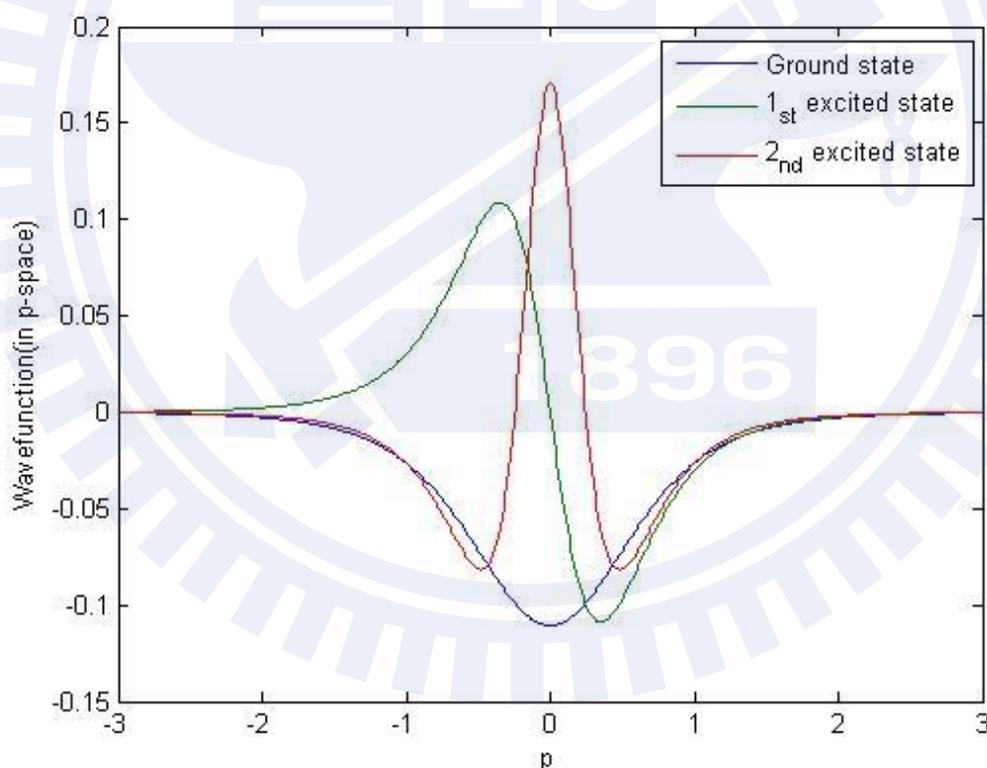
$$\frac{p^2}{2}\tilde{u}(p) + \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(p-q)\tilde{u}(q)dq = E\tilde{u}(p) \quad (3.42)$$

我們將介紹“simple man method”，所以我們將上式轉換成

$$\frac{p_i^2}{2}\tilde{u}(p_i) + \Delta p \sum_j \tilde{V}(p_i - p_j)\tilde{u}(p_j) = E\tilde{u}(p_i) \quad (3.43)$$

這樣子上列式子其實就是個 eigenvalue problem ($AX = \lambda X$)，根據前面章節所描述，Ar 原子的基態能量為 $\epsilon_0 = -0.58$ (a.u.)，而我們將使用基態的波函數來做為此次模擬的初始態，解出上式 eigenvalue problem 後，eigenvalue 就是該態的能量，eigenvector 則是其 wavefunction，因此找出其對應 -0.58 的 eigenvector，則是 Ar 原子基態的波函數[圖十一]，初始態便可以從這得到，之後我們必須將每個 eigenvector 歸一化

$$\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u}_i^*(p)\tilde{u}_i dp = 1 \quad (3.44)$$



[圖十一]：解出 eigenvalue problem 之後，能量為 -0.58(a.u.) 是基態的波函數，第一激發態與第二激發態的能量分別是 -0.24(a.u.) 以及 -0.1427(a.u.)。

3.5 投影

在模擬結束時，我們可以從 CESE method 得到經過雷射脈衝打入的波函數 $\tilde{u}(p)$ ，我們將此波函數 $\tilde{u}(p)$ 對 soft-Coulomb 位能的所有波函數作投影，則可以得知電子存在每個態之下的機率分佈，其式子表達如下

$$Prob(n) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{u}^*(p) \cdot \tilde{u}_n(p) dp \right|^2, \quad n = 1 \rightarrow N \quad (3.45)$$

$Prob$ 是代表電子在第 n 個態下的機率，從 Eq. (3.44) 的 eigenvalue problem 中，我們得到了在 soft-Coulomb 位能下的所有態的波函數，能量為負的 eigenvector 為束縛態，能量大於零我們的 eigenvector 為 continuous state。

3.6 數值計算結果

根據上一章節的描述，在動量空間中一維的 TDSE 可以表示成下式

$$i\tilde{u}_t = \left[\frac{p^2}{2} + A(t) \cdot p \right] \tilde{u} + \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(p-q) \tilde{u}(q) dq \quad (3.46)$$

式子中 $q = -1$ ，並且經過傅立葉轉換的"soft-Coulomb" potential $\tilde{V}(p)$ 可表示成

$$\tilde{V}(p) = \begin{cases} -\frac{1}{\pi} \ln(R + \sqrt{R^2 + c}) + \frac{1}{2\pi} \ln c & , p = 0 \\ -\frac{1}{\pi} K_0(\sqrt{c}|p|) & , p \neq 0 \end{cases} \quad (3.47)$$

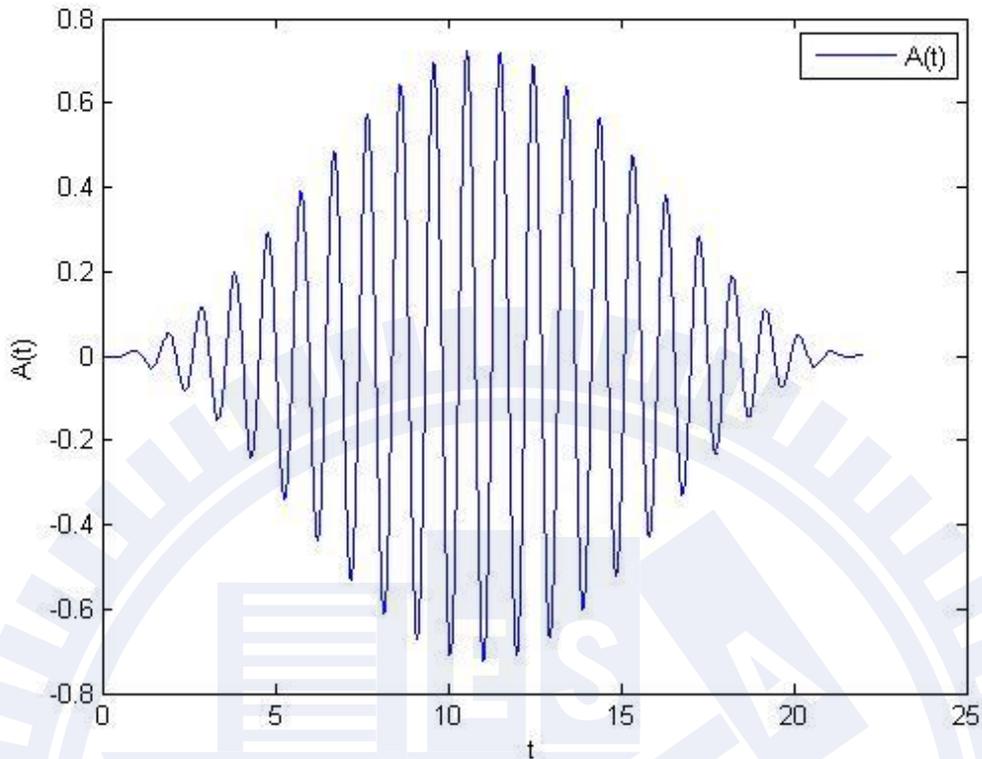
其中 K_0 是 2nd modified Bessel function， R 是 x 空間的邊界，我們將強雷射脈衝定義為

$$E(t) = E_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{T}\right) \sin(\omega t) \quad (3.48)$$

如同上一章節 Eq. (5.3) 所示，向量勢則可表示成

$$A(t) = \frac{E_0}{2\omega} \cos(\omega t) - \frac{E_0}{4} \left[\frac{\cos(\omega + \Omega)t}{\omega + \Omega} + \frac{\cos(\omega - \Omega)t}{\omega - \Omega} \right] + \frac{E_0}{2} \frac{\Omega^2}{\omega(\omega^2 - \Omega^2)} \quad (3.49)$$

上式中， $\Omega = \frac{2\pi}{T}$ ，並且 $\omega = 0.057$ (a.u.) (相當於波長 800nm)， T 是強雷射脈衝的週期，我們設定 $T=18$ optical cycles，由 [圖十二] 所示

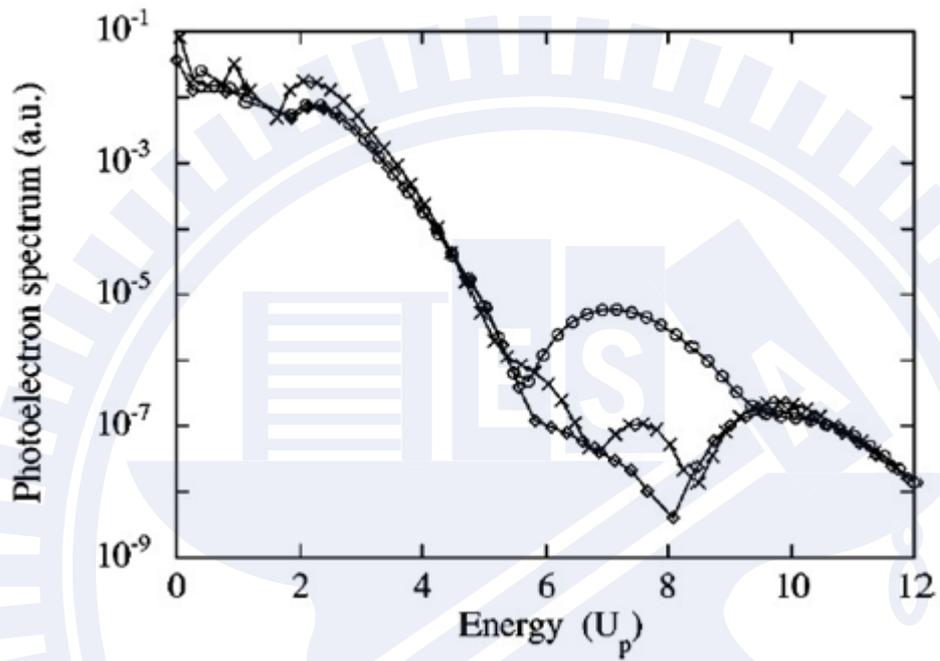


[圖十二]：向量勢 (Eq. (3.49))

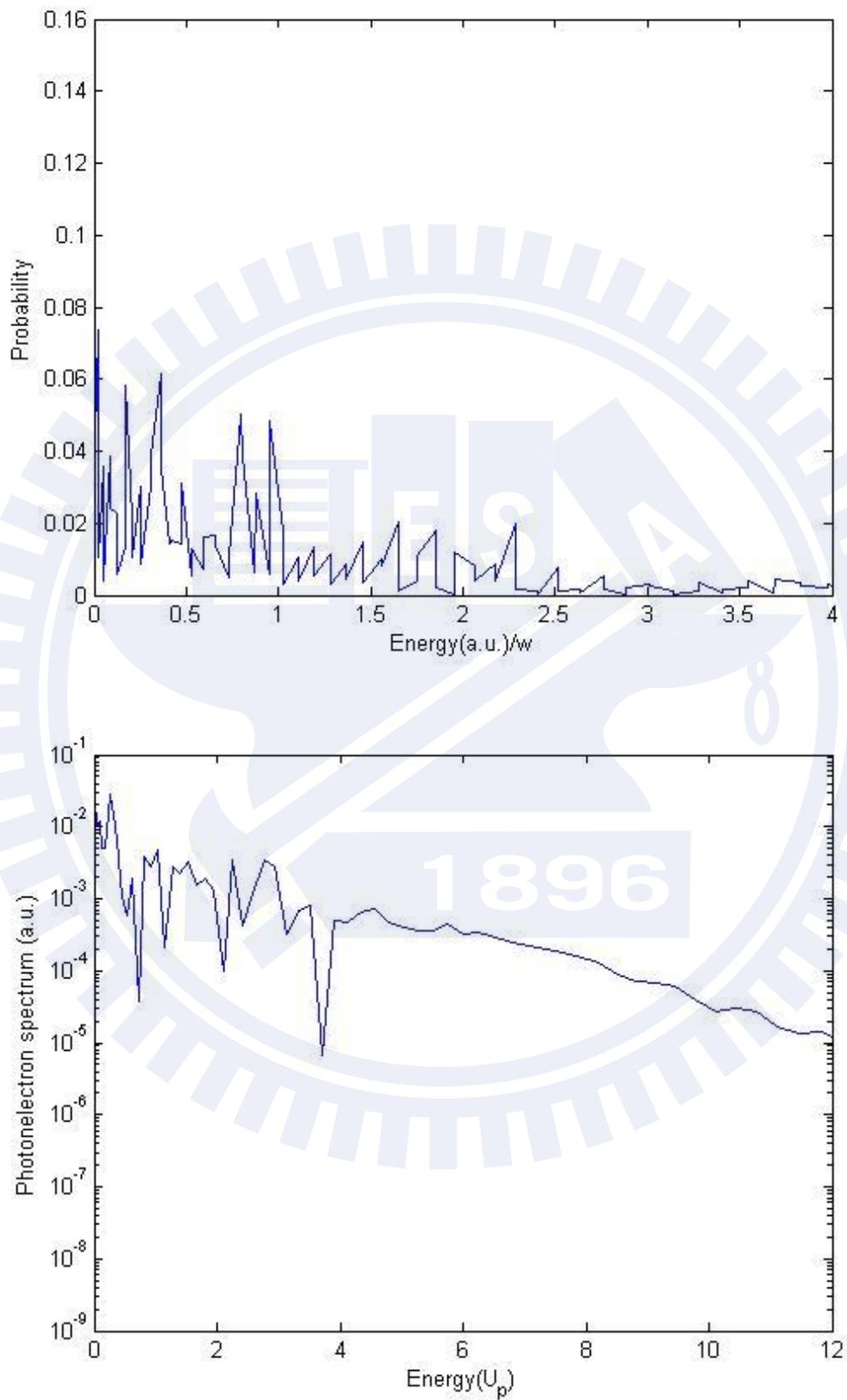
我們設定在 p-space 動量 p 的範圍為 -3 到 +3，在實驗的數據上，當外場強度 $E(t)$ 增加約 1%~2% 左右的強度時，ATI spectrum 以 U_p (ponderomotive energy) [9] 作為單位時， $7U_p$ 至 $12U_p$ 之間會有很大的變化 (約略為 $10 \sim 10^3$)，而我們將使用 CESE method 來重現這樣的現象，如 [圖十三] 所示。

我們使用了不同強度的電場來模擬，我們將使用 $E_0 = 1.02 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 、 $1.12 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 與 $1.22 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ，而以下 [圖十四]、[圖十五] 與 [圖十六] 為電子經過強雷射脈衝照射之後躍遷至 continuous state 的機率，所有的結果的參數皆為 $\Delta p = 0.012$ 與 $\Delta t = 0.0062$ ，[圖十四] 為 $E_0 = 1.02 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ，[圖十四] 上圖為 ATI spectrum，可以看到在 x 軸為 0、1 以及 2 的地方有的峰值在，下圖則是 x 軸用 U_p 為單位與機率的作圖；[圖十五] 是當 $E_0 = 1.12 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 時的結果，[圖十五] 上圖在 x 軸為 0.3、1.1 與 2 約略有峰值在；[圖十六] 為當 $E_0 = 1.22 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 的數值計算結果，而 [圖十六] 的上圖就沒有那麼明顯的 ATI peak 的樣子。

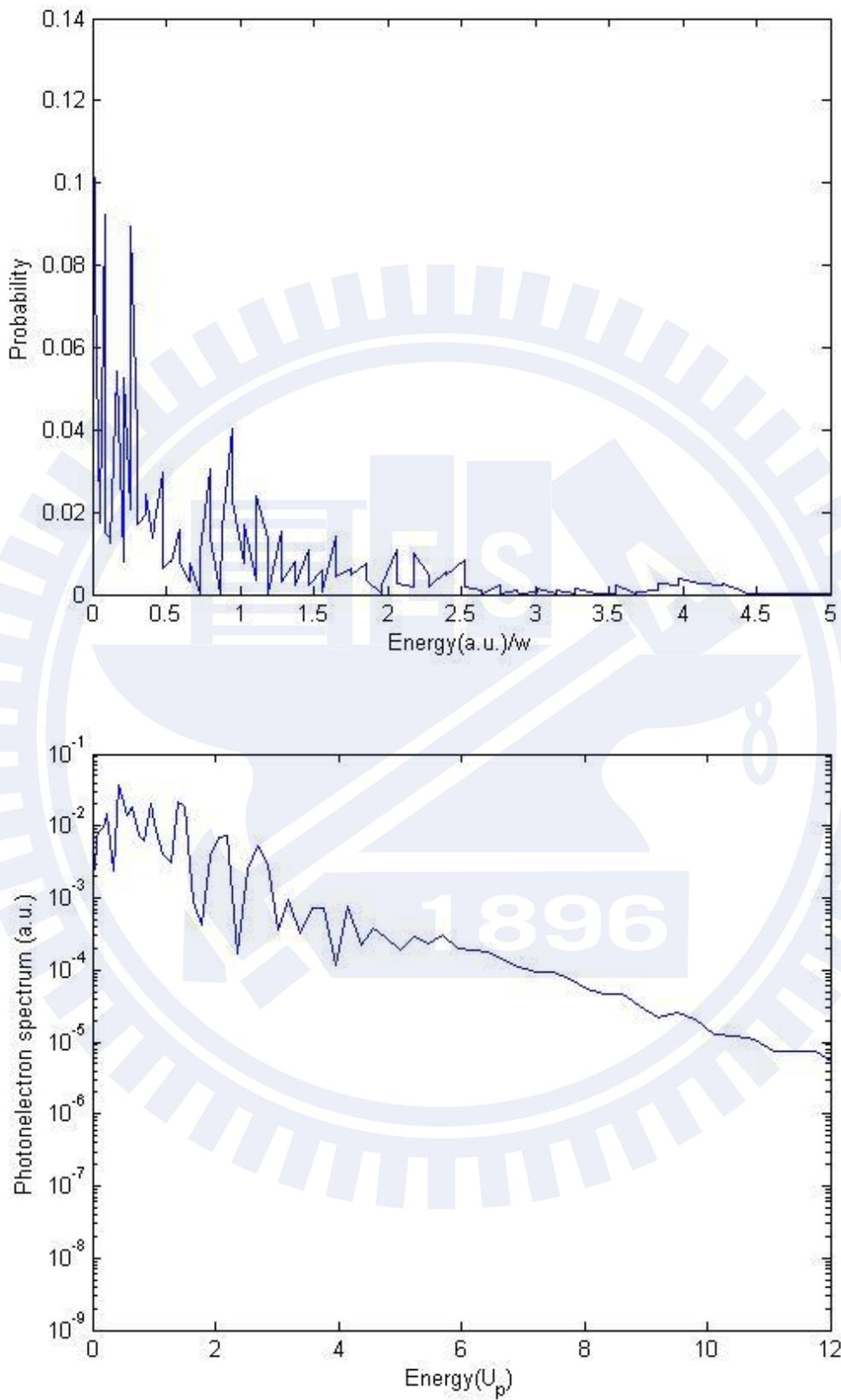
下列圖片中有那麼劇烈的震盪的原因可能是來至 continuous state 的計算，continuous state 在理論上應該是無限多個的，但是我們簡單的使用 "simple-man method" 只得出了一小部分的 continuous state，之後我們將三個結果放在同一張圖裡互相比較，其結果可以如 [圖十七] 所示。



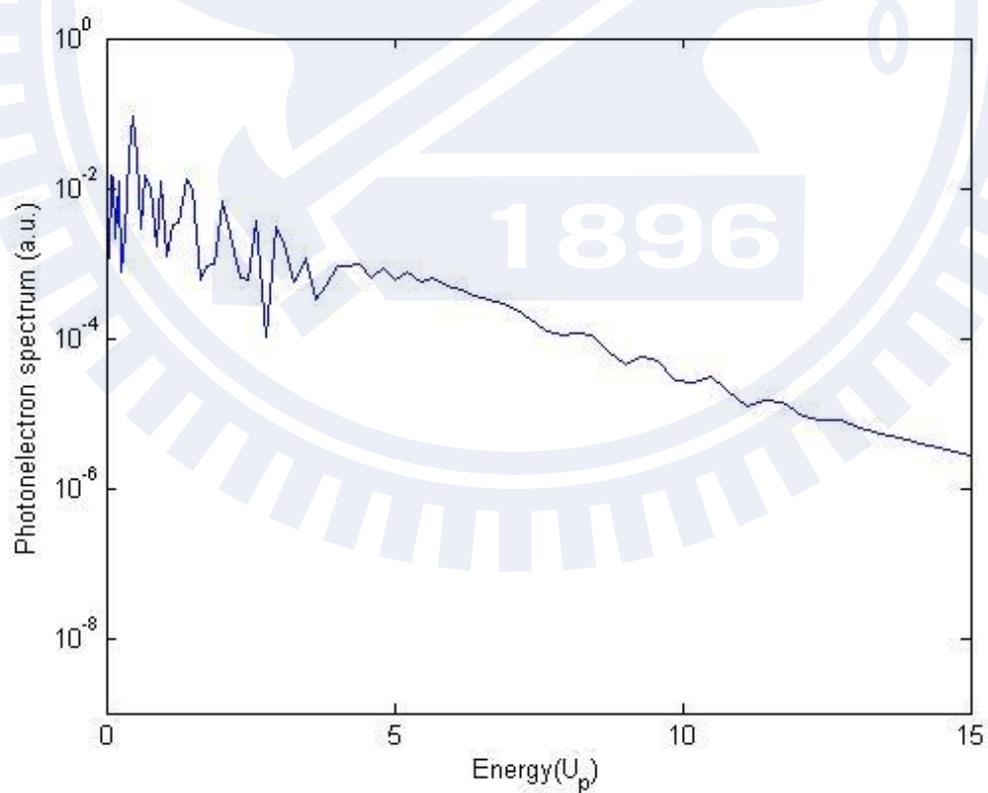
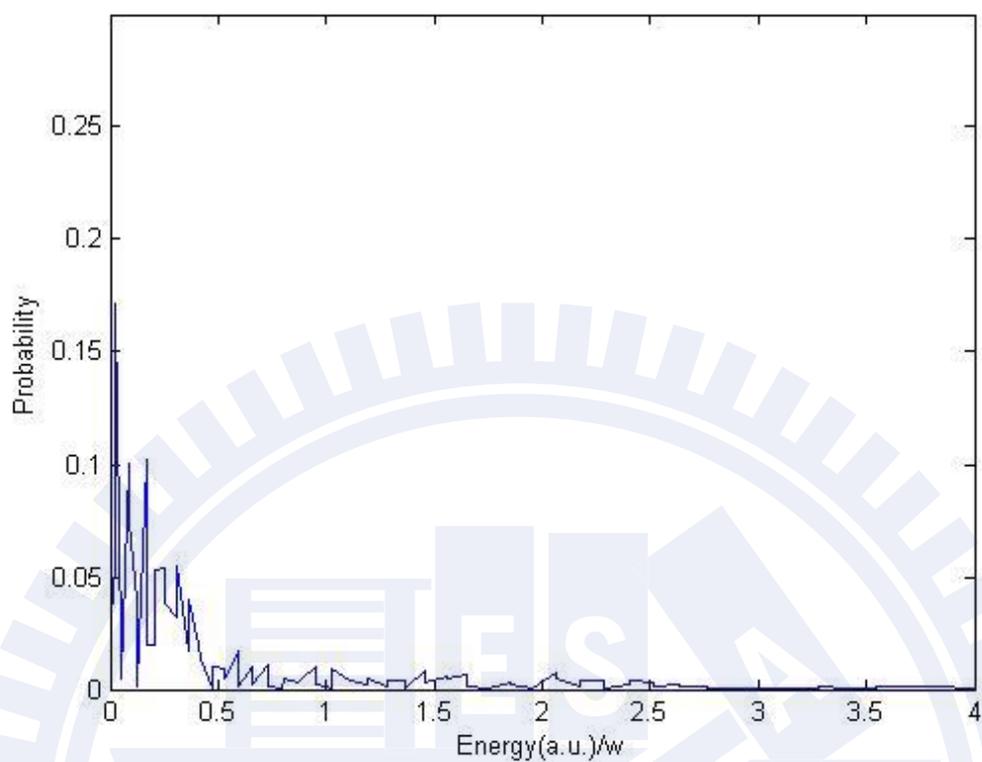
[圖十三]：Joseph Wassaf 等人在論文[10]中使用數值解解 TDSE 所得到的 ATI spectrum， $w=0.0577$ ，圖中“ \diamond ”、“ \times ”與“ \circ ”代表不同雷射脈衝的強度，分別是 $1.02 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 、 $1.12 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 與 $1.22 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ，而雷射脈衝的全部週期為 18 optical cycles。



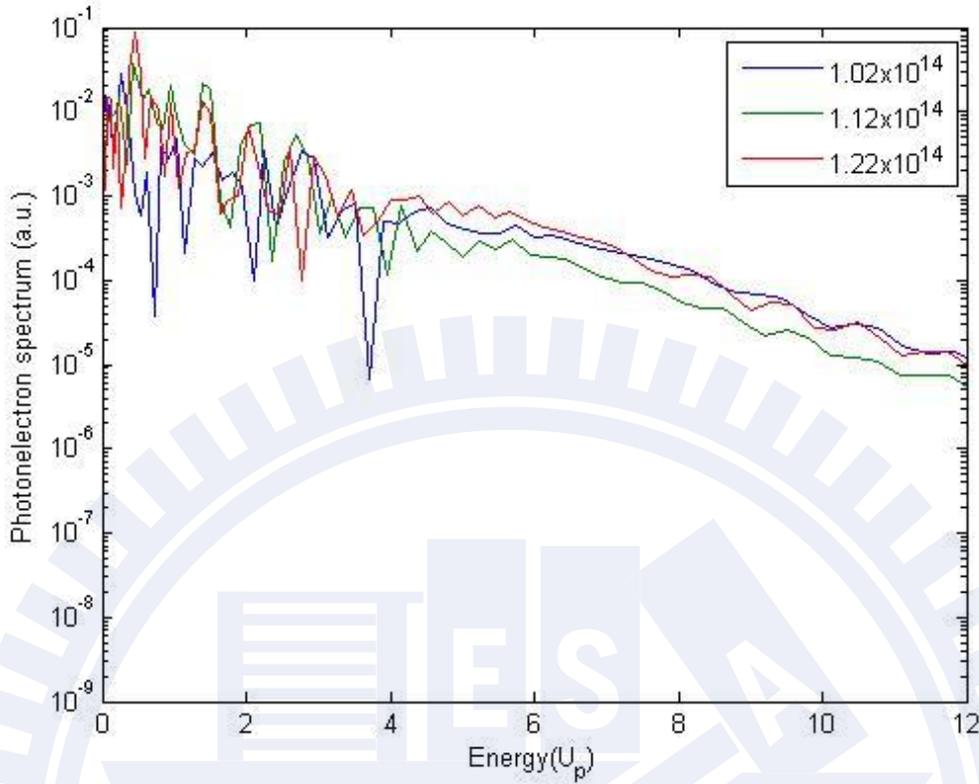
[圖十四]： $E_0=1.02 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ， $\text{FWHM}=12 \text{ (fs)}$ ， $\Delta p=0.012$ ， $\Delta t=0.0062$ 。



[圖十五] : $E_0=1.12 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, FWHM=12 (fs) , $\Delta p=0.012$, $\Delta t=0.0062$ 。



[圖十六] : $E_0=1.22 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, FWHM=12 (fs) , $\Delta p=0.012$, $\Delta t=0.0062$ 。



[圖十七]: $E_0=1.02 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 、 $1.12 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 、 $1.22 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, FWHM=12 (fs)。

從[圖十七]的結果看來，在 x 軸的 $5U_p$ 至 $9U_p$ 之間似乎沒有很大的變化，與並沒有得到我們所預料中的結果，由 Eq.(3.30) 我們可以知道電子在 soft-Coulomb 位能下加入強雷射脈衝之下的 TDSE 利用 CESE method 來模擬而其 source term 為

$$\int_{CE_{\pm}(j,n)} \left\{ \left[\frac{p^2}{2} + A(t) \cdot p \right] \tilde{u} + \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(p-q) \tilde{u}(q) dq \right\} d\tau \quad (3.50)$$

我們與簡諧振子加入 intense laser pulse 來互相做比較

$$\int_{CE_{\pm}(j,n)} \left[\frac{p^2}{2} + q \cdot A(t) \cdot p \right] \tilde{u} d\tau \quad (3.51)$$

由上面兩式子的第一項是為動能，再來是外加電場的影響，而 soft-Coulomb 位能比簡諧振子更多出了一項摺積(convolution)，因為在前一章節中，我們也使用了 CESE method 驗證了簡諧振子受到 intense laser pulse 的躍遷分布圖，因此我們可以確定在 source term 裡面，動能項與外加電場的影響的這一項處理上是沒有問題的，接下來我將來探討在 source term 裡，摺積的處理上是否有比較不正確的地方。

為了驗證是否是因為摺積這部分造成了 ATI spectrum 在 $7U_p$ 至 $10U_p$ 之間沒有預期中有 1 order 至 2order 的變化，convolution 可以表達成如下式

$$u(x) * v(x) = \int_{-\infty}^{\infty} u(x - \tau)v(\tau)d\tau \quad (3.52)$$

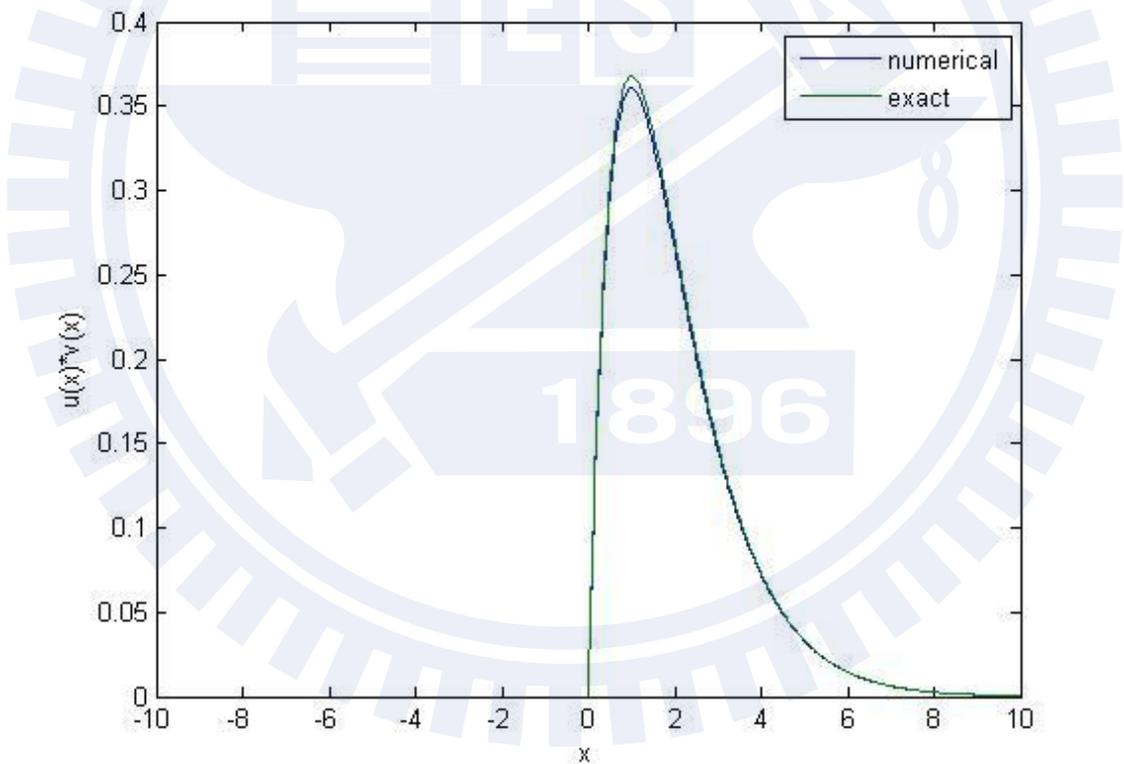
因為在 CESE method 中，在每個階段裡不斷的使用已知的兩個點來求得未知的第三個點，因此 source term 的計算也不斷的進行著，假設如果其中已經有了誤差，那誤差就像滾雪球般越滾越大，直到數值計算的最後也會深深的影響到結果，為了瞭解摺積在 source term 裡的影響，我們使用比較簡單得並且已經擁有解析解的函數來釋義，首先我們假設 $u(x)$ 與 $v(\tau)$ 皆為

$$u(x) = v(x) = \begin{cases} e^{-x}, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases} \quad (3.53)$$

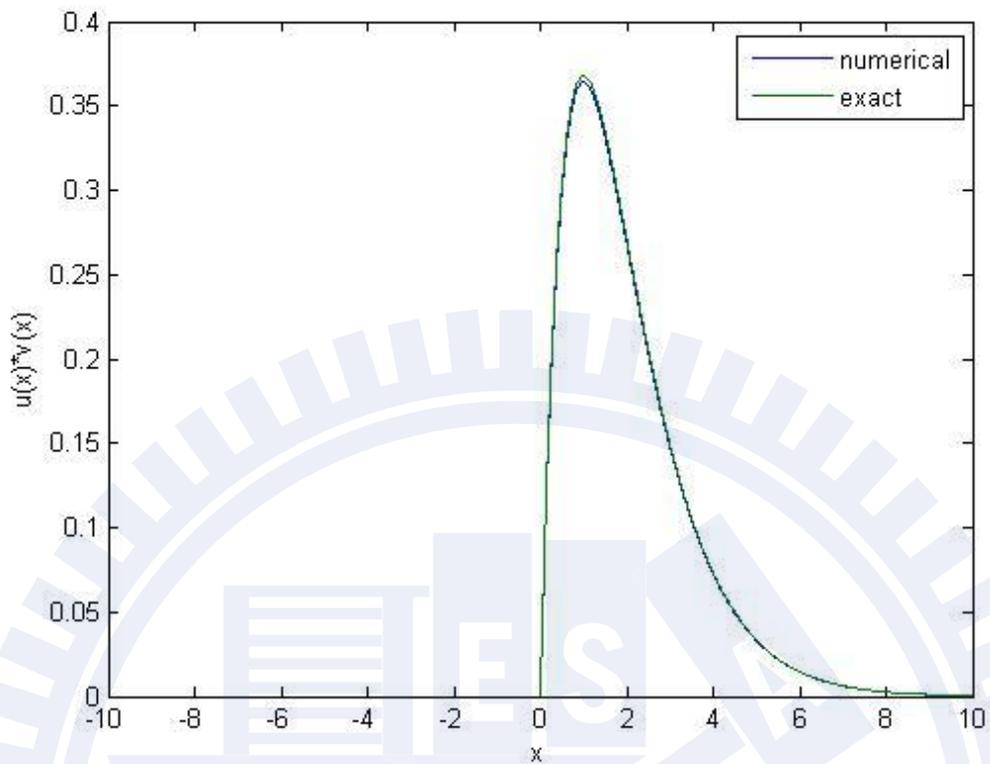
所得到的結果為

$$u(x) * v(x) = \begin{cases} xe^{-x}, & x \geq 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases} \quad (3.54)$$

我們利用上式的解析解與數值解所得到的結果互相比較，[圖十八]為 $\Delta x=0.01$ 時，與解析解互相做比較



[圖十八]： $\Delta x=0.01$ ，解析解與數值解的比較。



[圖十九]： $\Delta x=0.005$ ，解析解與數值解的比較。

，雖然在其他的方面與解析解蠻吻合的，但是在 $x=2$ 附近那裡，數值解與解析解有些微的差別，然而我們再增加其格子的精細度之後，當 $\Delta x=0.005$ 時，結果為[圖十九]，解析解與數值解互相比較的結果依然與解析解有些微的距離，雖然在更加的接近了，但是在 CESE method 中，在每個階段中的每個點中，如果摺積就帶著這微小的誤差，到最後從 CESE method 得到的數值解已經失去了很多資訊在裡頭，因此在經過 CESE method 所得出來數值解就因此失去了準度。

第四章

結論

論文中，我們用 CESE Method 分別解出了簡諧振子以及氫(Ar)原子受到強雷射脈衝打入後的 TDSE，在求出電子的躍遷光譜圖，在簡諧振子的部分，我們利用 CESE Method 所得到的數值解正好如解析解所預期的一樣，從前幾章的結中的結果看來，intense laser pulse 的強度只要越弱，所得到的結果也就越準確，雖然在雷射強度越來越大時，與解析解比較會有越來越大的差距，但是只要將格子的數目增加，這問題就可以解決了，所以使用 CESE Method 來計算動量空間中的 TDSE 可以說是沒有問題的；在”soft-Coulomb” potential 模擬氫(Ar)原子在 intense laser pulse 的照射下的部分，在本篇論文中，CESE method 並沒有得到與 Joseph Wassaf 等人在他們的論文中所預期的結果，在光電子(Photoelectron)能量為 $5U_p$ 到 $10U_p$ 之間並沒有很大的變化，回顧在套用 CESE 的過程中，比較兩個例子在 Eq.(3.7)與 Eq.(3.30)的 source term，比較兩式子會發現 Eq.(3.30)與 Eq.(3.7)更多出了一項摺積(convolution)，如果論文中簡諧振子所得到的躍遷機率分佈圖是合理的話，則可以確定在 source term 中動能項與雷射脈衝的影響這兩項的計算是正確的，而在摺積上計算上面就有了錯誤了。

在這篇論文中，我們只將 CESE method 的 Taylor expansion 展開到第一階而已，在之後，我們將會把泰勒展開式(Taylor's expansion)展開到第二階來計算其他量子力學上更多 TDSE 的問題。

參考資料

- [1] 更多細節與參考資料：<http://www.grc.nasa.gov/WWW/microbus/>
- [2] T. F. Jiang, “Calculation of atomic hydrogen and its photoelectron spectra in momentum space”, Computer Physics Communications, Volume 178, Issue 8, 15 April 2008, Pages 571-577.
- [3] S. C. Chang, W.m. To, “A New Numerical Framework for Solving Conservation Laws The Method of Space-Time Conservation Element and Solution Element”, NASA TM 104495, August 1991.
- [4] S. C. Chang, A. Himausu, C.y. Loh, X. Y. Wang and S.t.j. Yu, ”Robust and Simple Non-Reflecting Boundary conditions for the Euler Equations, A New Approach Based on the Space-Time CE/SE Method, NASA/TMX2003-212495/REV1 (2003).
- [5] Q. Su and J.H. Eberly, “Model Atom for Multiphoton Physics”, Phys. Rev. A. 44, 5997(1991).
- [6] G. G. Paulus, W. Nicklich, Huale Xu, p. Lambropoulos, and H. Walther, “Plateau in Above-Threshold-Ionization Spectra” Phys. Rev. Lett. 72, 2851(1994).
- [7] P. Hansch, M. A. Walker, and L. D. Van Woerkom, “Resinant Hot-electron Production in Above-Threshold-Ionization”, Phys. Rev. A. 55, R2535(1997).
- [8] M. J. Nandor, M. A. Walker, and L. D. Woerkom, “Detailed Comparison of Above-Threshold-Ionization Spectra from Accurate Numerical integrations and High-Resolution Measurements”, Phys. Rev. A. 60, R1771(1999).
- [9] $U_p = q^2 F_0^2 / (4m\omega^2)$: ponderomotive energy, 電子在加入大小為 F_0 並且頻率為 ω 的外場時, 電子受力而運動, 其平均動能就是 ponderomotive energy。
- [10] Joseph Wassaf, Valérie Vénard, Richard Taïeb, and Alfred Maquet, “Role of Resonance and Recollisions in Strong-Field Atomic Phenomena: Above Threshold Ionization”, Phys. Rev. A 67, 053405 (2003).