

TÉMATA BAKALÁŘSKÝCH PRACÍ

Jakub Benda, ÚTF

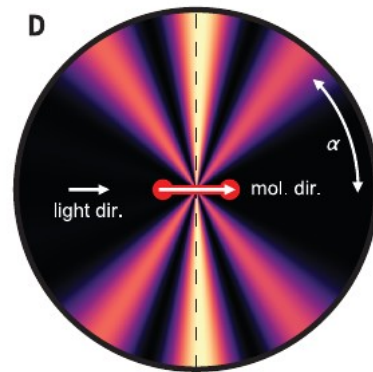
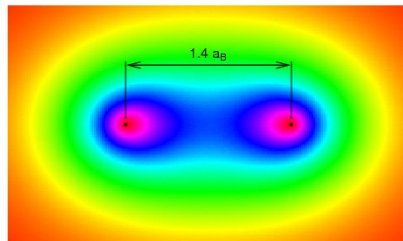
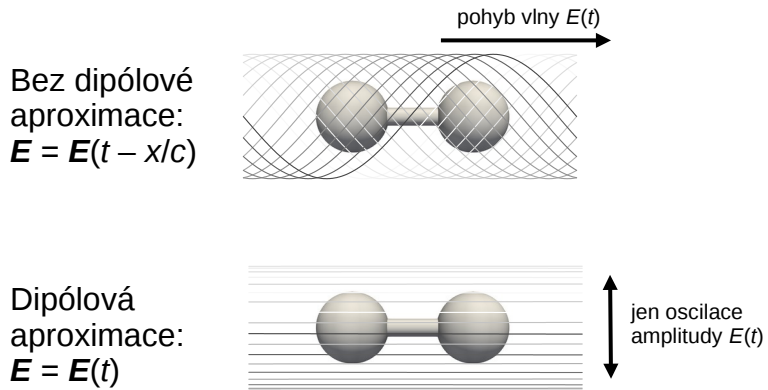
(postdoc ve skupině Dr. Zdeňka Mašína)

#1 Dvoucentrické interference ve fotoionizaci molekul při konečné rychlosti světla

#2 Skládání momentů hybnosti ve více-fotonové ionizaci molekul

#3 Mnohorozměrné dipólové integrály ve více-fotonové ionizaci molekul

#1 Dvoucentrické interference ve fotoionizaci molekul při konečné rychlosti světla



Amplituda ionizace:

$$A_{fi} = \langle \Psi_f^{(-)} | \mathbf{E} \cdot \mathbf{x} | \Psi_i \rangle$$

Dipólová aproximace:

$$\mathbf{E}(x) \sim e^{i\omega x/c} \sim 1$$

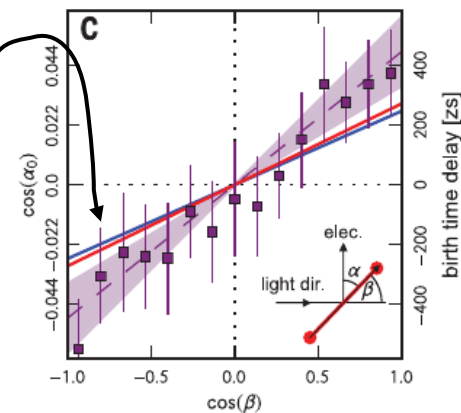
Kvadrupólová aproximace:

$$\mathbf{E}(x) \sim e^{i\omega x/c} \sim 1 + i\omega x/c$$

$$A_{fi} \sim \sum_j c_j \langle \Psi_f^{(-)} | x_j | \Psi_i \rangle$$

$$A_{fi} \sim \sum_j c_j \langle \Psi_f^{(-)} | x_j | \Psi_i \rangle + \sum_{jk} c_{jk} \langle \Psi_f^{(-)} | x_j x_k | \Psi_i \rangle$$

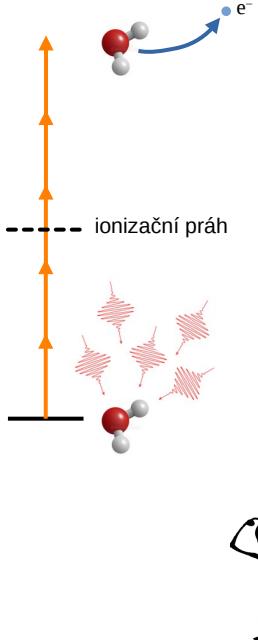
Jen prostá geometrie (modrá čára)
 k vysvětlení měření nestačí



Přechodové dipóly a kvadrupóly z R-maticové metody (dodám já)

included in full (22). This model is in reasonable agreement with the experimental results, but more theoretical work including electron-electron correlation is needed to clarify the deviation.

#2 Skládání momentů hybnosti ve více-fotonové ionizaci molekul



Úhlové rozdělení fotoelektronů:

$$I(\cos \theta) = \sum_{L=0}^{2N} b_L P_L(\cos \theta)$$

$$b_L = \sum_{\substack{l_f m_f m'_f, \lambda_f \mu_f \\ m_n \dots m_1, \mu_n \dots \mu_1}} (-1)^{m'_f} (2L+1) \sqrt{(2l_f+1)(2\lambda_f+1)} M_{fi, l_f m_f, m_n \dots m_1}^* M_{fi, \lambda_f \mu_f, \mu_n \dots \mu_1}^* \\ \times \sum_{\substack{j_1 \dots j_n, \tilde{j}_1 \dots \tilde{j}_n \\ v_1 \dots v_n, v'_1 \dots v'_n, \tilde{v}_1 \dots \tilde{v}_n}} \begin{pmatrix} l_f & \lambda_f & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_f & \lambda_f & L \\ -m'_f & m'_f & 0 \end{pmatrix} \frac{\delta_{j_n \tilde{j}_n} \delta_{v'_n \tilde{v}'_n} \delta_{v_n \tilde{v}_n}}{2j_n + 1} \\ \times (-1)^{m_f + v_1 + \dots + v_n} (2j_1 + 1) \dots (2j_n + 1) \\ \times \begin{pmatrix} l_f & 1 & j_1 \\ -m'_f & p_1 & -v'_1 \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} j_{n-1} & 1 & j_n \\ v'_{n-1} & p_n & -v'_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_f & 1 & j_1 \\ -m_f & m_1 & -v_1 \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} j_{n-1} & 1 & j_n \\ v_{n-1} & m_n & -v_n \end{pmatrix} \\ \times (-1)^{\mu_f + \tilde{v}_1 + \dots + \tilde{v}_n} (2\tilde{j}_1 + 1) \dots (2\tilde{j}_n + 1) \\ \times \begin{pmatrix} \lambda_f & 1 & \tilde{j}_1 \\ -m'_f & p_1 & -v'_1 \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} \tilde{j}_{n-1} & 1 & \tilde{j}_n \\ v'_{n-1} & p_n & -v'_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_f & 1 & \tilde{j}_1 \\ -\mu_f & \mu_1 & -\tilde{v}_1 \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} \tilde{j}_{n-1} & 1 & \tilde{j}_n \\ v_{n-1} & \mu_n & -\tilde{v}_n \end{pmatrix}.$$

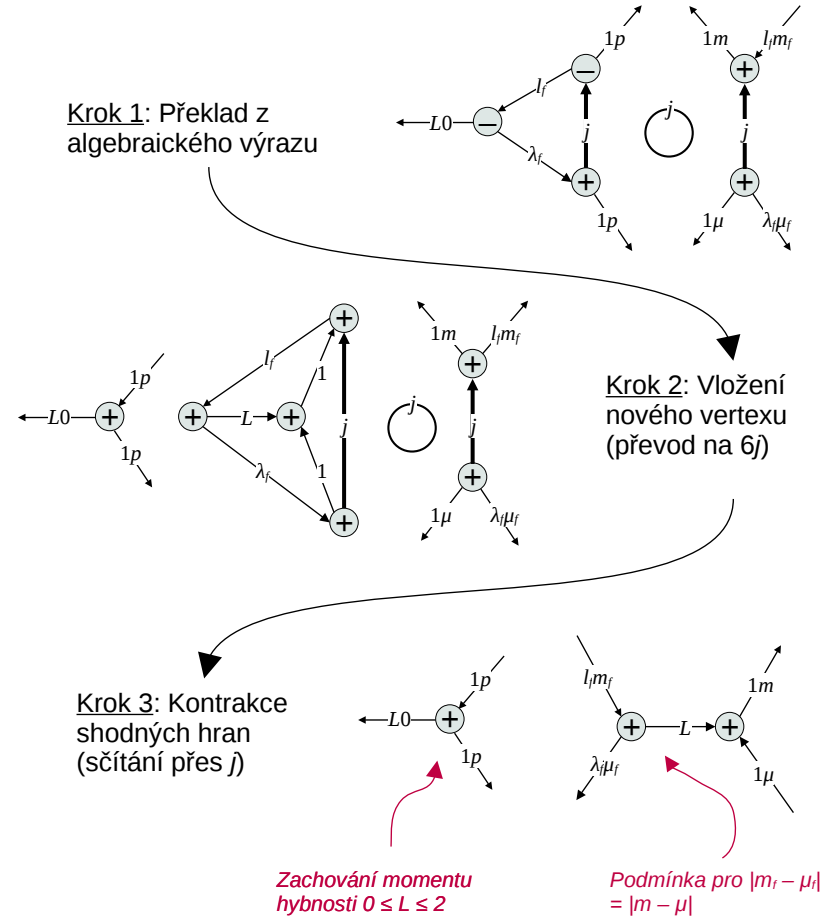


Možné úkoly

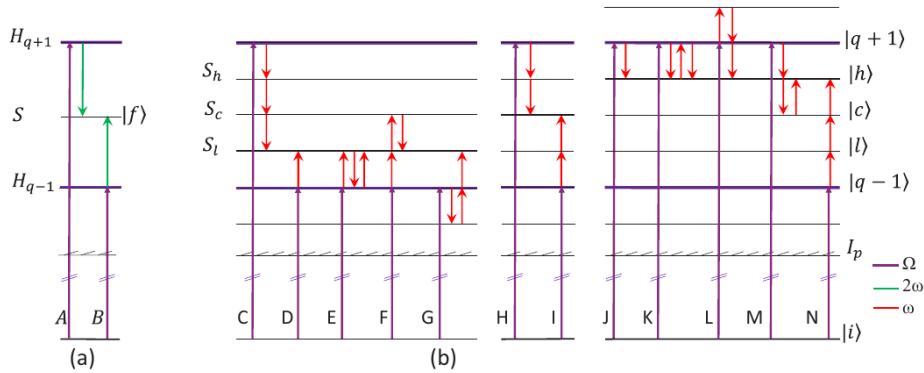
- Analýza výběrových pravidel ve vícefotonové ionizaci
- Případně: Aplikace v asymptotické teorii fotoionizačních zpoždění ("Wignerovo" vs. "molekulové" zpoždění)

Úprava pomocí grafické teorie momentu hybnosti

(ilustrace pro $N = 1$; bez fázových faktorů)



#3 Mnohorozměrné dipólové integrály ve více-fotonové ionizaci molekul

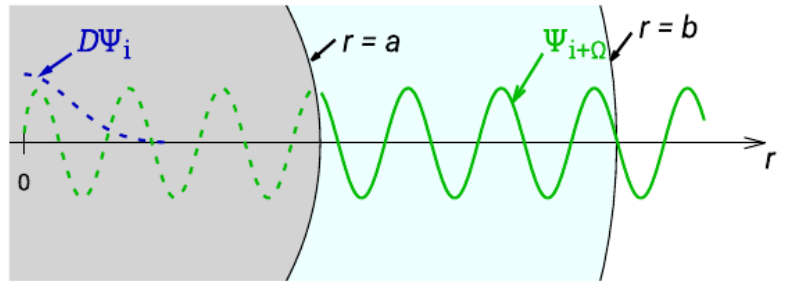


$$A^{(K)} = \langle \Psi_f^{(-)} | D_K \hat{G}_0 D_{K-1} \dots D_2 \hat{G}_0 D_1 | \Psi_i \rangle$$

Nad prahem ionizace mnoharozměrné integrály:

$$A^{(K)} = \int_a^\infty \dots \int_{r_3}^\infty \int_{r_2}^\infty H_J r^v H_{J-1} H_{J-2} r^u \dots r_2^b H_3 H_2 r_1^a H_1 dr_N \dots dr_1$$

$$H_j \sim e^{i k_j r}$$



rozklad do báze

numerická integrace

analytická integrace

Jednorozměrný integrál: *Levinova integrace*

$$I = \int_a^b \mathbf{f}(r) \cdot \mathbf{w}(r) dr = [\mathbf{p}(r) \cdot \mathbf{w}(r)]_a^b$$

$$\mathbf{p}(r)' + \mathbf{A}(r)^T \mathbf{p}(r) = \mathbf{f}(r) \quad \mathbf{A}(r) \mathbf{w}(r) = \mathbf{w}'(r)$$

V literatuře zobecněné na více rozměrů

Úkoly:

- Naprogramovat vícerozměrnou Levinovu integraci
- Aplikace na N -fotonovou ionizaci vodíkového atomu