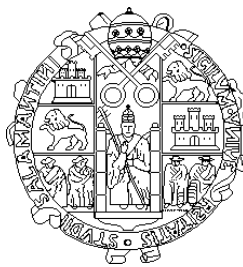


**UNIVERSIDAD DE SALAMANCA**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**Departamento de Física Aplicada**  
**Área de Óptica**



**Sobre la generación y propagación de  
armónicos en medios ionizables**

**Enrique Conejero Jarque**

**Salamanca, Abril 1998**

**UNIVERSIDAD DE SALAMANCA**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**Departamento de Física Aplicada**  
**Área de Óptica**

**Sobre la generación y propagación de  
armónicos en medios ionizables**

Memoria que presenta Enrique Conejero Jarque ante la  
Facultad de Ciencias de la Universidad de Salamanca para  
optar al Grado de Doctor en Ciencias Físicas

**Salamanca, Abril 1998**

LUIS PLAJA RUSTEIN, AYUDANTE DE FACULTAD DEL AREA DE  
OPTICA DE LA UNIVERSIDAD DE SALAMANCA, CERTIFICA:

Que la presente Memoria, "**Sobre la generación y propagación de armónicos en medios ionizables**" ha sido realizada bajo su dirección en el Área de Óptica del Departamento de Física Aplicada de la Universidad de Salamanca por el Licenciado Enrique Conejero Jarque y constituye su Tesis para optar al grado de Doctor en Ciencias Físicas.

Salamanca, Abril de mil novecientos noventa y ocho.

A todos los que me han hecho reír

*Maiorum more rite secuto in cuiuslibet operis capite locus  
ex scriptis alicuius illustris auctoris depromptus interdum imponitur.  
Quae quidem sententia ad rem expositam saepius nihil prorsus refert,  
sed tantummodo ad scriptoris scientiam ostendendam eruditionemque  
eius ingentem vindicandam adlatam esse comperimus.  
Cui rei populi vox accedit opportuna:  
quae de te gloriose praedicas, ipsis indiges.*

CAIUS FACETUS

## Lista de publicaciones

Trabajos en los que se basa la presente memoria:

- E. Conejero Jarque y L. Plaja, "Effect of time-dependent ionization on the harmonics generated by bound-bound transitions", *J. Opt. Soc. Am. B* **13**, 2724 (1996).
- E. Conejero Jarque y L. Plaja, "Harmonic generation with ionizing two-level atoms", *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31**, 1687 (1998).
- L. Plaja y E. Conejero Jarque, "Introduction of the Liénard-Wiechert correction to the particle simulation of relativistic plasmas", aceptado en *Phys. Rev. E*.
- V. Malyshev, E. Conejero Jarque y L. Roso, "Self-reflection of an intense ultrashort laser pulse by tunnel ionization on a solid surface", *J. Opt. Soc. Am. B* **14**, 163 (1997).
- E. Conejero Jarque, V. Malyshev y L. Roso, "Self-reflection and high-order harmonic generation due to plasma effect on the surface of a solid insulator: normal incidence", *J. Mod. Opt.* **44**, 563 (1997).
- E. Conejero Jarque y L. Plaja, "Harmonic generation during the ionization of a thin target irradiated by a strong laser field", enviado a *J. Opt. Soc. Am. B*.
- E. Conejero Jarque y L. Plaja, "Harmonic filtering in a laser generated thin plasma", enviado a *Phys. Rev. E*.

Otros trabajos realizados en periodo predoctoral y no reflejados en la presente memoria:

- V. Malyshev y E. Conejero Jarque, J. Opt. Soc. Am. B **12**, 1868 (1995).
- V. Malyshev y E. Conejero Jarque, J. Opt. Soc. Am. B **14**, 1167 (1997).
- E. Conejero Jarque y V. Malyshev, Opt. Comm. **142**, 66 (1997).
- V. A. Malyshev y E. Conejero Jarque, Opt. and Spectr. **82**, 582 (1997).
- V. Malyshev y E. Conejero Jarque, J. Lumin. **72-74**, 822 (1997).
- L. Plaja, E. Conejero Jarque y L. Roso, enviado a Astrophys. J. Suppl.
- E. Conejero Jarque y L. Plaja, en *Superstrong fields in plasmas*, M. Lontano, G. Mourou, F. Pegoraro y E. Sindoni, eds., AIP Conf. Proc. **426**, 360 (1998).
- F. Cornolti, A. Macchi y E. C. Jarque, en *Superstrong fields in plasmas*, M. Lontano, G. Mourou, F. Pegoraro y E. Sindoni, eds., AIP Conf. Proc. **426**, 55 (1998).

## **Agradecimientos y demás**

Tentado estoy de omitir estas páginas, tan importantes o más que las conclusiones en una tesis. Y no es la ingratitud la que me mueve a ello sino el hecho de que si tuviera que agradecer todo lo que debo, esto parecería el listín telefónico y la memoria simple apéndice suyo. La fuerza de la costumbre y, como digo, el miedo a parecer ingrato, me empujan a cumplimentar este requisito. Además, esto es lo único que no pasa censura, así que ahí va la letanía.

Comenzando por el terreno científico, debo agradecer la labor de las tres personas con las que tengo el honor de firmar los artículos en los que se basa este trabajo. Ellas han conseguido la incomparable hazaña de que un holgazán, ametódico, descreído, somnoliento, irracionalista, aficionado al fútbol y telespectador compulsivo, amén de otros muchos calificativos que pueden aplicárseme y que no vienen al caso, han conseguido, digo, que pueda presentar este trabajo, esperando, con la venia del tribunal, obtener el grado de doctor.

En primer lugar, y vergüenza me da decirlo puesto que él es el principal autor de lo que de bueno tiene este trabajo y yo simple escribano, agradezco al director de la tesis la arriesgada elección de su primer discípulo, tal vez, todo hay que decirlo, por falta de otro (discípulo) mejor en ese momento. Durante el tiempo que ha llevado la realización de esta tesis el único enfrentamiento reseñable que hemos tenido ocurrió el pasado verano en Varenna, tranquilo pueblecillo a la vera del lago de Como, cuando dos simpáticas conserjes de nuestro hotel me abordaron en un ascensor para sonsacarme si mi estudiante tenía novia. Yo les contesté que en realidad era él el maestro, que tenía



la edad de Cristo, dos hijos y estaba divorciado. En aquel mismo instante me di cuenta de lo viejo que soy y lo joven que parece. Las chicas no se creyeron nada pero él las rechazó porque no eran demasiado agraciadas. Juró venganza, eso sí.

También soy, creo, el primer discípulo del ex-capitán del Ejército Rojo que se atrevió a dirigirme la tesina y me enseñó que para inventar la bicicleta hace falta pensar mucho. Nunca le agradeceré lo suficiente todo lo que ha hecho por desasnarme científicamente. Espero que lo siga haciendo.

Poco puedo decir del dilectísimo y adoradísimo gran jefe. Le agradezco no sólo el dinero que consigue para ordenadores sino sus sabios y ponderados consejos en todos los terrenos y la oportunidad que me dio de unirme a un grupo entonces pequeño pero muy prometedor. Es tan entrañable que ahora incluso se preocupa por mi deteriorada salud mental.

A continuación agradezco a todos los que han sido y son miembros del grupo subversivo *El fotón charro* especialmente por aguantarme cuando invado su territorio profiriendo blasfemias en alta voz. No nombro a todos por si me dejo alguno. Mención especial merece aquél que me ha proporcionado los programas del hidrógeno y su propia tesis, sobre la que he escrito esta. Es una de las pocas personas con las que he compartido cama, en su caso por obligación. También la merece el otro que ha compartido conmigo habitación y lavabo, pero no cama, durante tres largos años en el Bartolo, aparte de dieciséis en las aulas, y sin el cual me temo que todavía estaría intentando ejecutar mi primer programa (el famoso *Hello, world!*) en una máquina UNIX. Debo recordar también a las dos personas que me abrieron las puertas de la óptica antes incluso de que hubiera acabado la carrera, cuando aún no sabía qué quería ser de mayor. Ellos y mi compañera de despacho, que escucha paciente mis diarias imprecaciones por los cuelgues de *blas.usal.es* y me deja el diccionario de inglés, han soportado y soportan con resignación mi ineptitud experimental sin una mala queja.

Gracias también a ti, querido lector, por haber llegado al menos hasta

este punto de los agradecimientos. ¡Adelante, ya falta poco!

Por una vez, quiero agradecer públicamente al vicario del Magnífico en la Tierra, léase el Director de nuestro Departamento, la impagable ayuda prestada en aspectos administrativo-burocráticos. Es más, en su honor escribiré aquí las palabras *lentes* y *gafas*, que, creo, no vuelven a aparecer en toda la memoria.

Debo recordar también, porque me lo exigió expresamente, a ese ex-anarquista y ahora suspendedor de aprendices de optometría en tierras murcianas que se pasó seis horas de reloj fotocopiándome unas tablas de secciones eficaces de colisión en las frías tierras germanas. He cumplido.

No puedo dejar de hacer mención al amigo italiano, amantísimo padre de familia y gran estudioso de la receta del bacalao al pil-pil, a quien nunca perdonaré que nos metiera en el mundillo de los plasmas, en el que aún brilla más nuestra ignorancia. Y en este capítulo internacional, obligada es también la referencia al corrector de la versión inglesa de la tesis, quien prácticamente la ha reescrito con rotulador verde sobre un penoso borrador de mi cosecha que parecía producto de uno de esos abominables programas traductores con los que pretenden subdesarrollarnos.

Y en el terreno amistoso, aunque no se descarta alguna colaboración científica, me acuerdo también de mis coleguillas de francachelas y tertulias, por desgracia cada vez menos frecuentes a medida que crecen nuestros ingresos (de algunos) y disminuye nuestro pelo (de todos).

Finalmente, y no por ser lo menos importante sino todo lo contrario, paso a lo afectivo. Me refiero aquí a mi familia, tanto biológica como adquirida, porque, como decía don Vito Corleone, la familia es lo más importante en la vida. Todos ellos han soportado, e incluso han echado de menos, mi habitual desidia comunicativa, se han preocupado por mí más que yo mismo y hasta han llorado de vez en cuando por mi causa. Un beso para cada uno y dos, pues si no se queja, para Laura.

# Indice

<b>Introducción</b>	<b>3</b>
<b>1 Conceptos preliminares</b>	<b>9</b>
1.1 Ionización atómica no lineal . . . . .	9
1.1.1 Tipos de ionización no lineal . . . . .	10
1.2 Tasa de ionización en el régimen de túnel . . . . .	13
1.3 Espectro de emisión de un sistema. Generación de armónicos . . .	17
1.3.1 Espectro de emisión de partículas clásicas . . . . .	18
1.3.2 Espectro de un sistema cuántico . . . . .	22
1.4 Generación de armónicos en átomos . . . . .	27
1.4.1 Modelo clásico . . . . .	33
1.4.2 Modelo cuántico . . . . .	37
1.4.3 Resolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo . . . . .	42
1.5 Generación de armónicos por electrones libres . . . . .	44
1.6 Propagación de armónicos en medios extensos. Desajuste de fase .	49
1.6.1 Efectos de desajuste de fase en medios neutros . . . . .	50
1.6.2 Efectos de desajuste de fase en medios ionizados . . . . .	54

<b>2</b>		
1.7	Generación de armónicos en plasmas . . . . .	56
<b>2</b>	<b>Generación de armónicos en un sistema de dos niveles abierto</b>	<b>65</b>
2.1	Generación de armónicos en sistemas de dos niveles . . . . .	65
2.2	Efecto de la ionización dependiente del tiempo en los armónicos generados por transiciones entre estados ligados [95] . . . . .	72
2.3	Generación de armónicos en un sistema de dos niveles con ionización y recombinación [96] . . . . .	80
<b>3</b>	<b>Simulación numérica de la interacción entre plasmas y pulsos láser</b>	<b>95</b>
3.1	Simulación de plasmas mediante códigos de partículas . . . . .	95
3.2	Integración de las ecuaciones de Maxwell. Corrección relativista en los cálculos PIC [104] . . . . .	103
3.3	Ionización en un código PIC . . . . .	118
3.4	Modelo de cargas fijas para la formación de un plasma por un láser	122
<b>4</b>	<b>Propagación de armónicos en plasmas generados por un láser</b>	<b>125</b>
4.1	Generación de armónicos por ionización inhomogénea [114, 115] .	125
4.2	Efecto de la ionización en el caso de campos intensos [118] . . . .	134
4.3	Efectos de propagación . . . . .	144
4.3.1	Variaciones de longitud de onda. Corrimiento al azul . . .	144
4.3.2	Desajustes de fase . . . . .	150
4.3.3	Filtro de armónicos en plasmas sobredensos [128] . . . . .	150
	<b>Conclusiones</b>	<b>163</b>

# Introducción

En las últimas décadas ha habido un renovado interés en los estudios de la interacción entre campos electromagnéticos y medios materiales. El motivo principal es, sin lugar a dudas, la disponibilidad de láseres de pulsos cada vez más cortos e intensos en una carrera que parece no tener fin, pues cada pocos meses se logra reducir algún femtosegundo la duración de los pulsos y aumentar algún teravatio su intensidad. De este modo, supuestos teóricos que no ha mucho parecían experimentalmente imposibles, se van realizando en los laboratorios de manera casi inevitable. A su vez, la abundancia de experimentos requiere una cada vez mayor comprensión de los fenómenos físicos para poder interpretar los datos obtenidos. Así, van uniéndose a este esfuerzo investigadores procedentes de campos tan diversos como la óptica, la física atómica y molecular, la física de plasmas, e incluso en los últimos tiempos la física nuclear, la electrodinámica cuántica y hasta la astrofísica. Las posibilidades que ofrece un campo tan amplio son por tanto casi infinitas.

Uno de los fenómenos más atractivos es el de la generación de armónicos, puesto que se ha demostrado que es un proceso capaz de ofrecer fuentes de radiación coherente y relativamente intensa con frecuencias en el rango del ultravioleta y los rayos X blandos. Si el láser infrarrojo y visible ha tenido tanta importancia en todo lo relativo a la estructura molecular y atómica, es de esperar que el láser de rayos X pueda significar lo mismo en cuanto a la estructura nuclear, los fenómenos relativistas y quizá otras aplicaciones que ahora apenas pueden vislumbrarse. Sirva

como ejemplo el hecho de que ya se ha observado la creación de pares electrón-positrón en experimentos con láseres, fenómeno que será tanto más probable cuanto más elevadas sean las frecuencias con las que trabajemos. Otra posible aplicación de los armónicos altos en la que se está trabajando es la obtención de trenes de pulsos de duración del orden del attosegundo, para los cuales el calificativo de ultracorto se queda largo.

La generación de armónicos altos parece estar íntimamente ligada al proceso de ionización. En un gas poco denso, como veremos, la ionización y la subsiguiente recombinación de los electrones es la fuente de los armónicos. En un sólido o plasma es el movimiento de los electrones ionizados (bien por el propio láser o bien por algún otro mecanismo) el que genera la radiación armónica. Además, si queremos obtener unas eficiencias significativas necesitamos bastante más de un átomo o electrón radiando: hace falta un medio extenso cuyas partículas, cuantas más mejor, emitan radiación de forma coherente. Por ello, el estudio de la propagación de los armónicos es también básico.

En este trabajo queremos aportar nuestro "granito de arena" al estudio de la generación y propagación de armónicos en medios ionizables. Como no somos muy buenos en el laboratorio y los ordenadores están cada vez más baratos, nuestra contribución será de carácter teórico, con abundante cálculo numérico, ya que las simulaciones son una herramienta muy buena tanto para la comprensión de los fenómenos físicos como para el contraste de los resultados experimentales. Los medios ionizables a los que nos referimos son fundamentalmente dos. En primer lugar están los átomos aislados, relativamente fáciles de tratar. Las conclusiones que se obtienen a partir del estudio de átomos aislados son extrapolables al caso de gases tenues en los que es posible ignorar las interacciones átomo-átomo. Sin embargo, si aumentamos la densidad del medio y también la intensidad del láser de forma que la ionización sea apreciable, las interacciones átomo-átomo (o ion-ion)

y átomo-electrones libres cambian de forma drástica la fenomenología, provocando que la radiación emitida sea bien distinta. Por ello hay que estudiar también otros medios ionizables como son los sólidos, que sometidos a pulsos suficientemente intensos generan de forma rápida plasmas. Como vamos a ver, los plasmas también son capaces de generar armónicos altos e incluso presentan algunas ventajas con respecto a los gases.

El problema de la interacción entre un átomo y un campo electromagnético sólo es soluble exactamente en estos momentos en el caso de átomos o iones hidrogenoides, que es el que nosotros vamos a suponer en este trabajo. A pesar de ello, y en lo que se refiere a la generación de armónicos, los resultados son aplicables con bastante generalidad a otros tipos de átomos, obteniéndose resultados experimentales parecidos con vapores alcalinos y gases nobles a baja presión. Ello es debido sin duda a que los procesos que intervienen en la generación de armónicos, particularmente la ionización, son cualitativamente semejantes en todos ellos. Más difícil aún es el tratamiento de medios sólidos, en los que el número de partículas implicadas en las interacciones es a efectos prácticos infinito. De nuevo, se comprueba experimentalmente que los armónicos generados por medios tan distintos como el aluminio o el plástico son semejantes para pulsos lo suficientemente cortos e intensos, lo que no es de extrañar si nos damos cuenta de que para esos pulsos la ionización casi total en los dos casos se produce en muy pocos ciclos ópticos (a veces en menos de uno) y a partir de ese instante ambos no son más que un conjunto de electrones e iones a merced del campo. Por eso es posible idealizar nuestro medio y convertirlo en un conjunto de átomos, de nuevo hidrogenoides por simplicidad, que tras ionizarse se convierten en un ion y un electrón independientes que evolucionan según las leyes de la electrodinámica clásica.

En cuanto al campo eléctrico, consideraremos siempre que está linealmente polarizado, coincidiendo esta vez felizmente el interés científico, ya que la generación

de armónicos es más eficiente con campos linealmente polarizados tanto en gases como en sólidos, con la simplicidad numérica, pues esto nos permitirá reducir la dimensionalidad de nuestro problema. Los pulsos incidentes tendrán además una única frecuencia fundamental. Tanto los campos polarizados elípticamente como los pulsos de varios colores están siendo estudiados en los últimos tiempos por su posible utilidad en la generación de pulsos ultracortos y en el control de la eficiencia de los armónicos, pero no hablaremos de ellos en este trabajo. En el caso de la interacción con átomos aislados, despreciaremos el campo secundario emitido por el átomo frente al campo externo, porque el primero será muy débil. Por contra, en el caso de medios extensos, la aportación del medio será fundamental y siempre calcularemos el campo de una forma autoconsistente.

En lo que se refiere a la estructura de esta memoria, hemos dividido sus contenidos en cuatro capítulos. El primero tiene un carácter introductorio y nos servirá para establecer los cimientos sobre los que construimos nuestro trabajo y para ponernos al día en lo obtenido hasta la fecha. Repasaremos brevísimamente la fenomenología de la ionización atómica no lineal, particularmente en el régimen de túnel, que es el más interesante para la generación de armónicos altos, recordando algunos de los modelos que explican dicha generación; recuperaremos las expresiones para las tasas de ionización que vamos a utilizar; definiremos lo que entendemos por espectro de emisión de un sistema (clásico o cuántico); repasaremos también la generación de armónicos por electrones libres y para finalizar apuntaremos varios aspectos de la generación y propagación de armónicos en medios ionizables o ionizados que nos van a ser útiles más adelante. El segundo capítulo está dedicado al estudio de la generación de armónicos en un sistema muy sencillo compuesto de dos niveles ligados cuya población puede ionizarse a un estado del continuo y reinteraccionar posteriormente con el núcleo. El objetivo es determinar la influencia sobre los armónicos de una ionización dependiente del



tiempo y de las transiciones entre estados ligados, aspectos que generalmente no se tienen en cuenta en los modelos existentes. En el tercer capítulo explicaremos cómo simulamos la interacción de un plasma con un pulso láser, centrándonos en algunos problemas que surgen cuando la dinámica de las partículas es relativista y en la inclusión del proceso de ionización, que no es habitual en los códigos existentes. En el cuarto capítulo expondremos los resultados obtenidos en nuestro estudio de los armónicos generados durante la ionización de un sólido por un láser, estableciendo la importancia relativa de los distintos procesos que contribuyen a esa generación; veremos además los importantes efectos de la propagación en el caso de medios suficientemente extensos, como son los desajustes de fase, los desplazamientos cromáticos o el filtrado de frecuencias. Finalizaremos la memoria con un resumen de las conclusiones obtenidas durante la elaboración de este trabajo.

Antes de entrar en materia conviene hacer un apunte sobre las unidades utilizadas a lo largo de la memoria. En casi toda ella se han usado unidades atómicas, que son las más cómodas en el estudio de la interacción entre átomos y campos electromagnéticos. Recordemos que las unidades atómicas viene definidas a partir de  $e = m = \hbar = 1$ ,  $c \simeq 137$ , donde  $e$  y  $m$  son el valor absoluto de la carga del electrón y su masa, y  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío. En este sistema, debido a que  $\hbar = 1$ , energía y frecuencia se expresan con la misma variable  $\omega$ . En las secciones en las que abordamos cuestiones puramente clásicas hemos utilizado, por ser más habituales en la literatura, unidades gaussianas, reseñándolo explícitamente. Las expresiones relacionadas con los campos electromagnéticos son prácticamente iguales en ambas unidades. Además, siempre que nos referimos a datos experimentales como longitudes de onda o intensidades de los láseres hemos añadido la equivalencia en unidades del sistema internacional para una mejor comprensión por parte de un lector no familiarizado con las unidades atómicas.



# Capítulo 1

## Conceptos preliminares

### 1.1 Ionización atómica no lineal

La fotoionización atómica es un fenómeno que ha atraído el interés de los científicos desde hace casi un siglo y que aún hoy se mantiene vivo. Tras haber resultado decisiva en la introducción y aceptación de la teoría cuántica, en la actualidad representa un ejemplo claro de la insuficiencia de las aproximaciones perturbativas para explicar ciertos fenómenos físicos.

La ionización de un sistema cuántico es no lineal cuando se verifica la condición  $\omega_0 < I_p$ , siendo  $\omega_0$  la frecuencia de la radiación incidente e  $I_p$  el potencial de ionización, esto es, la energía necesaria para extraer el electrón menos ligado del sistema [1]. Es claro que tal tipo de proceso viola la relación de Einstein del efecto fotoeléctrico [2], pero podemos salvar la situación recurriendo a una ionización multifotónica que verifique  $K\omega_0 > I_p$ , siendo  $K$  el número entero de fotones absorbidos por el sistema. Por supuesto los procesos multifotónicos no están restringidos al caso de la ionización (transición desde un estado ligado a uno del continuo) sino que son ampliables a cualquier transición entre estados ligados, modificando el tercer postulado de Bohr desde su versión inicial  $\omega_0 = E_f - E_i$  hasta la multifotónica  $K\omega_0 = E_f - E_i$ . Físicamente, la posibilidad de transiciones multifotónicas se justifica en el principio de incertidumbre para la energía y el tiempo  $\delta\omega\delta t \geq 1$ , que

permite pasar al sistema por una serie de estados virtuales durante un tiempo  $\delta t$  con un defecto de energía  $\delta\omega$ .

### 1.1.1 Tipos de ionización no lineal

El proceso de ionización no lineal depende principalmente de tres parámetros: la frecuencia  $\omega_0$  y la amplitud  $E_0$  del campo electromagnético y la energía de ligadura del electrón  $I_p$ . En realidad, una combinación de estos parámetros, el parámetro de adiabaticidad de Keldysh [3] definido como

$$\gamma = \frac{\omega_0(2I_p)^{1/2}}{E_0} = \sqrt{\frac{I_p}{2U_p}}, \quad (1.1)$$

separa los distintos regímenes de ionización no lineal en átomos.  $U_p = E_0^2/4\omega_0^2$  es la energía ponderomotriz, que es la energía que en promedio un campo armónico cede a un electrón libre durante un ciclo óptico.

Repasemos brevemente los diferentes tipos de ionización cuando el campo electromagnético tiene una amplitud muy inferior a la del campo atómico (buenos resúmenes de la interacción de átomos con campos intensos que incluyen numerosas referencias pueden encontrarse en [1, 4, 5, 6, 7]).

#### Ionización multifotónica

Si se verifica que  $\gamma \gg 1$ , es decir, que la energía de ionización es mucho mayor que la ponderomotriz, lo cual ocurre para frecuencias relativamente altas (siempre por debajo de la de ionización, por supuesto) o campos muy poco intensos, el proceso más probable es el de ionización multifotónica (conocida por sus siglas en inglés, MPI). En este caso podemos describir gráficamente el proceso como la absorción por un electrón de un número entero  $K$  de fotones para pasar al continuo con una energía cinética  $\omega_f = K\omega_0 - I_p$ . La tasa de ionización (probabilidad de ionización

por unidad de tiempo) para campos débiles es del tipo

$$w = \sigma^{(K)} \left( \frac{E_0^2}{\omega_0} \right)^K, \quad (1.2)$$

donde  $\sigma^{(K)}$  es la sección eficaz generalizada, que depende de la frecuencia y polarización del campo y de la estructura atómica, pero no de la intensidad de la radiación. Es evidente que para  $K = 1$  recuperamos la conocida fórmula para el efecto fotoeléctrico en la que la dependencia es lineal con la intensidad del campo. En principio, el número de fotones será el estrictamente necesario para que se produzca la ionización. Sin embargo, cuando la intensidad del campo eléctrico es lo suficientemente alta, pueden ocurrir procesos a un número de fotones superior al mínimo necesario con una probabilidad comparable, apareciendo la ionización sobre-umbral (ATI). La energía del electrón en el estado final será entonces  $\omega_f = (K + S)\omega_0 - I_p$ , siendo  $S$  el número de fotones adicionales absorbidos. Los primeros experimentos sobre ionización multifotónica fueron realizados en 1977 por Lompré y otros [8], mientras que la ionización sobre-umbral fue descubierta por Pierre Agostini y otros en 1979 [9].

### Ionización por túnel

Vayamos ahora al caso en el que el parámetro de Keldysh es inferior a la unidad, lo que acontece para frecuencias muy pequeñas y campos moderadamente intensos. Entonces estaremos dentro del llamado régimen de ionización por túnel (TI), que es el que más nos va a interesar debido a la peculiaridad de los armónicos generados en él. Para entender qué ocurre en este caso es útil recordar cómo afecta un campo eléctrico estático intenso a un átomo. Pensemos por simplicidad en un átomo de hidrógeno en el estado fundamental. El paquete de ondas se encuentra entonces fuertemente ligado por la barrera coulombiana tal y como vemos en la figura 1.1a. Al aplicar un campo externo polarizado en la dirección  $x$ , el potencial instantáneo

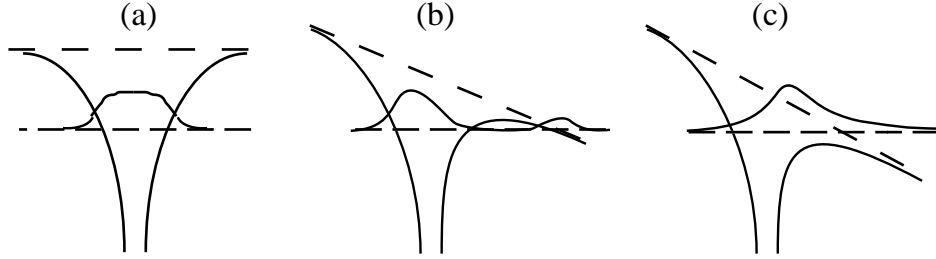


Figura 1.1: Esquema de la evolución del paquete atómico en ausencia de campo externo (a), cuando el campo permite la ionización por túnel (b) y cuando el campo es tan intenso que se produce ionización por supresión de barrera (c).

se ve modificado, pasando a ser  $V = -1/r + Ex$  (figura 1.1b). El electrón ve una barrera de potencial que, si el campo es lo suficientemente intenso, puede atravesar por efecto túnel. El cálculo de la tasa de ionización es relativamente sencillo en este caso y nos lleva a la expresión [10]

$$w = \frac{4}{E} \exp\left(-\frac{2}{3E}\right), \quad (1.3)$$

que crece al aumentar la intensidad del campo aplicado, como es de esperar.

En el régimen de túnel no tenemos un campo estático pero la frecuencia es tan pequeña que podemos utilizar una aproximación adiabática, válida cuando el periodo óptico es mucho mayor que el tiempo de túnel. Este tiempo de túnel puede estimarse de una manera simple como el cociente de la distancia entre los puntos de corte de la barrera de potencial con la energía no perturbada del electrón dividida por la velocidad con la que el electrón atraviesa dicha barrera [11, 12] y que es  $\tau_t \approx \sqrt{I_p}/E_0$ . El electrón podrá atravesar la barrera cuando ese tiempo de túnel sea menor que un ciclo óptico, es decir, precisamente cuando el parámetro de Keldysh sea menor que la unidad [3, 13]. Puede suponerse entonces que el electrón "ve" una barrera de potencial que va evolucionando tan lentamente que le permite escapar por túnel. Al cabo de medio ciclo el campo cambiará de signo y una parte de la población ionizada por este mecanismo volverá a las proximidades del núcleo. Más adelante veremos el importante efecto que tiene esta población en

la generación de armónicos.

### Ionización por supresión de barrera

El caso límite del túnel es la ionización por supresión de barrera (figura 1.1c), que tiene lugar cuando la amplitud del campo es lo suficientemente alta como para que la barrera de potencial quede por debajo del nivel del potencial de ionización, pudiendo entonces el paquete electrónico abandonar libremente las proximidades del núcleo. Para intensidades aún mayores, en contra de lo esperado intuitivamente, la ionización no es más rápida sino que se puede llegar a un régimen de estabilización en que gran parte de la población queda situada en los estados ligados más próximos al continuo (estados de Rydberg) debido a efectos de interferencia en la función de onda. Tanto la ionización por supresión de barrera como sobre todo la estabilización son difíciles de observar experimentalmente debido a que requieren campos tan intensos que los átomos se han ionizado casi completamente por vía multifotónica o de túnel durante la primera parte de los pulsos láser antes de que puedan llegar a interaccionar con la cresta de los pulsos.

## 1.2 Tasa de ionización en el régimen de túnel

Dado que es una expresión que vamos a usar frecuentemente a lo largo de este trabajo, consideramos conveniente indicar la deducción de la fórmula para la tasa de ionización en el régimen de túnel [1, 14, 15].

Partimos de la expresión que nos da la amplitud de probabilidad de una transición entre un estado inicial ligado  $|i\rangle$  y uno final del continuo  $|f\rangle$  y que viene dada por el elemento de la matriz S en la imagen de interacción [13]:

$$a_{if}(t) = -i \int_0^t \langle \Psi_f | V(\mathbf{r}, t') | \Psi_i^0 \rangle dt'. \quad (1.4)$$

donde el término  $V(\mathbf{r}, t)$  tiene que incluir en principio tanto el potencial coulomb-

biano como la interacción con el campo electromagnético.

La aproximación de Keldysh-Faisal-Reiss [3, 16, 17] (KFR en la literatura) consiste en despreciar la contribución coulombiana sobre el estado del continuo. En este caso el término de interacción en el gauge del momento se reduce a

$$V(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}}{c} + \frac{\mathbf{A}^2}{2c^2} \quad (1.5)$$

y el estado final es una onda de Volkov:

$$\Psi_f^{(V)} = \exp \left[ -i\mathbf{p}\mathbf{r} + \frac{i}{2} \int (\mathbf{p} + \frac{\mathbf{A}}{c})^2 dt \right]. \quad (1.6)$$

Si queremos tener en cuenta el efecto del potencial atómico en el estado final podemos usar la teoría de perturbaciones y pasar de  $\Psi_f^{(V)}$  a  $I\Psi_f^{(V)}$  donde la corrección coulombiana viene dada por [14]

$$I = \exp \left( -i \int \frac{-Z}{r} dt \right), \quad (1.7)$$

siendo  $Z$  la carga del átomo o ion en cuestión. Esta corrección viene determinada por los momentos en que el campo está cerca de sus valores extremos, que es cuando la probabilidad de atravesar la barrera es máxima. Dependiendo del estado inicial y de la polarización del campo electromagnético, la integral (1.4) tomará un valor u otro. Por ejemplo, en el caso de un estado inicial con número cuántico principal  $n$  y orbital  $l = 0$  y un campo polarizado linealmente  $\mathbf{E} = E_0 \cos \omega_0 t \hat{x}$ , la amplitud de la transición para campos suficientemente pequeños se reduce a

$$a_{nf}(t) = \frac{2^n}{n!} \left( \frac{C_I Z \pi}{n} \right)^{1/2} \int_0^t \exp [ig(t')] dt', \quad (1.8)$$

donde  $C_I = (2Z^3/n^3 E_0)^{2n}$  viene del término de interacción de Coulomb  $I$  y la función  $g(t)$  está definida como

$$g(t) = \left( \frac{p^2}{2} + \frac{Z^2}{2n^2} + \frac{E_0^2}{4\omega_0^2} \right) t + \frac{p_x E_0}{\omega_0^2} \cos \omega_0 t - \frac{E_0^2}{8\omega_0^3} \sin 2\omega_0 t. \quad (1.9)$$



Para resolver la integral (1.8) se van sumando las distintas contribuciones ciclo a ciclo hasta llegar a la siguiente expresión para la probabilidad de transición

$$W_{nf}(t) = |a_{nf}(t)|^2 = \left| a_{nf} \left( \frac{2\pi}{\omega_0} \right) \right|^2 \frac{\omega_0^2 t}{2\pi} \delta \left( \frac{p^2}{2} + \frac{Z^2}{2n^2} + \frac{E_0^2}{4\omega_0^2} - N\omega_0 \right). \quad (1.10)$$

$N$  es el número de fotones absorbidos en el proceso y la función  $\delta$  de Dirac expresa la conservación de energía. Para hallar la distribución angular y de energía de los electrones ionizados en el proceso a  $N$  fotones basta dividir la anterior expresión por el tiempo, multiplicar por la densidad de estados finales e integrar en el momento, llegando a

$$\frac{dw_N}{d\Omega} = \frac{2^{2n-1} p \omega_0^2 Z C_I}{(2\pi)^3 n n!^2} \left| \int_0^{2\pi/\omega_0} \exp [ig(t)] dt \right|^2, \quad (1.11)$$

donde el momento  $p$  debe cumplir la conservación de energía indicada en (1.10). La integral en la expresión (1.11) no es fácil de resolver sin hacer más aproximaciones. En el límite de túnel, para campos por debajo de la supresión de barrera, puede usarse el método del punto de ensilladura o de la fase estacionaria (véanse por ejemplo [18, 19]) en el cuál sólo se considera la contribución a la integral de los puntos más significativos, que son los puntos de retorno clásicos, es decir, aquellos en los que  $\dot{g}(t) = 0$ . Realizando esta aproximación e integrando en el momento angular se llega a

$$w_N = \frac{\omega_0^2 C_I 2^{2n}}{2\pi Z p} \exp \left( -\frac{2Z^3}{3En^3} - \frac{p^2 \gamma^3}{3\omega_0} \right), \quad (1.12)$$

donde  $\gamma$  es el parámetro de Keldysh. Finalmente, sumando al número de fotones tendremos la probabilidad total de ionización por unidad de tiempo

$$w = \frac{2^{2n} n C_I E}{4Z n!^2} \left( \frac{3En^3}{\pi Z^3} \right)^{1/2} \exp \left( -\frac{2Z^3}{3n^3 E} \right), \quad (1.13)$$

donde se ha utilizado el hecho de que en el régimen de túnel  $\gamma \ll 1$ . Si comparamos con la tasa en el caso de polarización circular, en el que la amplitud del campo es siempre la misma, observamos que

$$w_l = \left( \frac{3En^3}{\pi Z^3} \right)^{1/2} w_c, \quad (1.14)$$

quedando claro que esa diferencia aparece por haber promediado el campo eléctrico a lo largo de un ciclo en el cálculo anterior. Por tanto, si queremos utilizar esa expresión para un campo instantáneo dependiente del tiempo tendremos que eliminar ese término.

Es posible realizar un cálculo similar para estados iniciales con momento angular no nulo y átomos o iones diferentes del hidrógeno (suponiendo eso sí que es válida la aproximación de un único electrón activo). El resultado general es [20]

$$w(|E|) = C_I |C_{nl}|^2 f(l, m) \frac{Z^2}{2n^2} \left( \frac{n^3 |E|}{2Z^3} \right)^{m+1} \exp\left(-\frac{2Z^3}{3n^3 |E|}\right), \quad (1.15)$$

donde  $n$ ,  $l$ ,  $m$  son los números cuánticos efectivos y las constantes  $f$  y  $C_{nl}$  se definen como

$$f(l, m) = \frac{(2l+1)(l+|m|)!}{2^{|m|}(|m|)!(l-|m|)!}, \quad |C_{nl}|^2 = \frac{2^{2n}}{n(n+l)!(n-l-1)!}. \quad (1.16)$$

Para obtener las expresiones promediadas basta sustituir  $|E|$  por  $E_0$  y añadir el término  $(3E_0 n^3 / \pi Z^3)^{1/2}$ . Es trivial comprobar que en el caso del estado fundamental del átomo de hidrógeno para un campo estacionario la expresión (1.15) se reduce a (1.3).

La validez de estas fórmulas está restringida como hemos dicho al régimen de túnel. Esto nos impone dos limitaciones sobre la intensidad del campo. Por un lado, para que el parámetro de Keldysh sea inferior a uno y pueda aplicarse la aproximación adiabática, el campo debe ser lo suficientemente intenso (o bien su frecuencia muy pequeña, con lo cual estaríamos en el infrarrojo o incluso las microondas, región espectral en la que se ha observado túnel desde los estados de Rydberg [13, 21]). En este sentido, cuando  $\gamma \approx 1$  coexisten los mecanismos de túnel e ionización multifotónica, pero se ha demostrado que las expresiones obtenidas anteriormente funcionan bastante bien en esa zona fronteriza [22]. En el otro extremo, sabemos que tampoco podemos excedernos en la intensidad del campo para no pasar al régimen de supresión de barrera. El cálculo del valor

crítico para el que el campo electromagnético hace que la barrera quede superada es muy sencillo si suponemos que el electrón escapa precisamente en la dirección del campo eléctrico. En este caso basta igualar la energía de ligadura  $-I_p$  a la suma del potencial atómico y el de interacción  $-Z/x + Ex$ , llegando a un campo crítico  $E_{cr} = I_p^2/4Z$  [23]. Para el estado fundamental del hidrógeno su valor es  $E_{cr}^{1s} = 0.0625$  u.a., que equivale a una intensidad de  $I \simeq 1.4 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>. En realidad, para un sistema tridimensional como es el hidrógeno este valor crítico es mayor puesto que el electrón se mueve no sólo en la dirección de polarización del láser. La supresión de barrera real para su estado fundamental se produce para un campo  $E_{cr}^{1s} \simeq 0.15$  u.a. ( $I \simeq 10^{15}$  W/cm<sup>2</sup>) [24, 25]. Por encima de este valor las expresiones para la ionización por túnel sobreestiman las tasas de ionización reales en el régimen de supresión de barrera [14].

En cualquier caso, estas fórmulas son utilizadas habitualmente en los cálculos que conllevan ionización atómica, incluso fuera de su rango estricto de validez, debido a su simplicidad y a que han sido contrastadas con resultados experimentales con bastante éxito para distintos materiales [26]. A nosotros nos interesa especialmente el hecho de que dependen fuertemente del tiempo de forma indirecta a través del campo oscilatorio.

### 1.3 Espectro de emisión de un sistema. Generación de armónicos

La generación de armónicos es quizá el proceso más característico de la óptica no lineal. Desde las primeras observaciones de generación de segundo armónico en medios cristalinos [27, 28], este fenómeno ha venido estudiándose de forma frecuente debido a la disponibilidad de láseres cada vez más intensos. En medios gaseosos poco densos pronto se pasó de observar armónicos de orden bajo explicables con teorías perturbativas a detectar armónicos de orden alto cuya intensidad no de-

crecía exponencialmente. Recientemente se han llegado a observar armónicos por encima del orden 150 con láseres de neodimio ( $\lambda = 1053$  nm) y de titanio-zafiro ( $\lambda = 800$  nm) [29, 30]. Actualmente en la generación de armónicos no se pretende tanto batir marcas de frecuencia alta, puesto que ya se alcanza con cierta facilidad la zona de los rayos X blandos, como conseguir mayores eficiencias en intensidad y controlar las propiedades espaciales y temporales de los armónicos, así como profundizar en el conocimiento de los distintos mecanismos que hacen posible la emisión coherente en frecuencias tan altas.

La generación de armónicos es por tanto un fenómeno de carácter general. Cuando iluminamos un medio material con un campo electromagnético intenso, se producen en su interior una serie de oscilaciones no lineales, tanto en las cargas libres como en las ligadas, que hacen que el campo secundario emitido por el medio no tenga únicamente la frecuencia del incidente sino otras contribuciones, algunas de las cuales tienen frecuencias múltiplos enteros de la inicial. Son precisamente esas frecuencias las que llamamos armónicos.

Antes de describir la generación de armónicos en sistemas reales es conveniente recordar qué entendemos por espectro de emisión de un sistema, tanto clásico como cuántico. En la presente sección no utilizaremos unidades atómicas sino gaussianas, por ser más habituales en la literatura.

### 1.3.1 Espectro de emisión de partículas clásicas

Para hallar la energía radiada por una partícula clásica acelerada es conveniente utilizar los potenciales de Liénard-Wiechert. Dado que vamos a basarnos en ellos cuando hablemos de las simulaciones en plasmas, no está de más recordar cómo se calculan en el espacio tridimensional. Partamos directamente de las ecuaciones de onda para los potenciales [31]

$$\nabla^2 \phi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -4\pi\rho, \quad (1.17)$$

$$\nabla^2 \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A} = -\frac{4\pi}{c} \mathbf{J}, \quad (1.18)$$

donde  $\rho$  y  $\mathbf{J}$  son las densidades de carga y corriente, respectivamente, y se ha impuesto la condición del gauge de Lorentz

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \phi = 0. \quad (1.19)$$

Los campos eléctrico y magnético vendrán dados por

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}, \quad (1.20)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (1.21)$$

Para resolver la ecuación de ondas usamos el método de la función de Green. El propagador retardado en el caso tridimensional es [32]

$$G^+(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = \frac{\delta(t' - t + R/c)}{R}; \quad t > t', \quad R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, \quad (1.22)$$

siendo la solución para el potencial escalar

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \int \int G^+(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \rho(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' dt'. \quad (1.23)$$

Una expresión análoga se obtiene para el potencial vector sin más que sustituir  $\rho$  por  $\mathbf{J}/c$ . Para una sola partícula de carga  $q_m$ , posición  $\mathbf{r}_m$  y velocidad  $\mathbf{v}_m$ , las densidades de carga y corriente pueden expresarse como

$$\rho(\mathbf{r}, t) = q_m \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_m(t)] = q_m \delta\left[\mathbf{r} - \mathbf{r}_m(0) - \int_0^t d\tau \mathbf{v}_m(\tau)\right], \quad (1.24)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = q_m \mathbf{v}_m(t) \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_m(t)] = q_m \mathbf{v}_m(t) \delta\left[\mathbf{r} - \mathbf{r}_m(0) - \int_0^t d\tau \mathbf{v}_m(\tau)\right]. \quad (1.25)$$

Sustituyendo (1.22) y (1.24) en (1.23) e integrando en  $t'$  llegamos a

$$\phi_m(\mathbf{r}, t) = q_m \int \frac{d\mathbf{r}'}{R} \delta\left[\mathbf{r}' - \mathbf{r}_m(0) - \int_0^{t-R/c} d\tau \mathbf{v}_m(\tau)\right], \quad (1.26)$$

y haciendo el cambio de variable

$$\mathbf{u} = \mathbf{r}' - \mathbf{r}_m(0) - \int_0^{t-R/c} d\tau \mathbf{v}_m(\tau); \quad d\mathbf{u} = (1 - \beta_m \cdot \mathbf{n})|_{t-R/c} d\mathbf{r}', \quad (1.27)$$

siendo  $\beta_m = \mathbf{v}_m/c$ ,  $\mathbf{n} = (\mathbf{r}' - \mathbf{r})/R$  (el vector unitario en la dirección de observación) e indicando  $|_{t-R/c}$  que  $\beta_m$  debe medirse en el tiempo retardado. Con este cambio de variable la solución de (1.26) es ya sencilla:

$$\phi_m(\mathbf{r}, t) = \frac{q_m}{R_m(1 - \beta_m \cdot \mathbf{n}_m)} \Big|_{ret}, \quad (1.28)$$

donde  $R_m = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_m|$ ,  $\mathbf{n}_m = (\mathbf{r}_m - \mathbf{r})/R_m$  y ahora el tiempo retardado es  $t'_m = t - R_m(t')/c$  y la posición  $\mathbf{r}_m(t'_m) = \mathbf{r}_m(0) + \int_0^{t'_m} d\tau \mathbf{v}_m(\tau)$ . Análogamente se obtiene la expresión para el potencial vector, que resulta ser

$$\mathbf{A}_m(\mathbf{r}, t) = \frac{q_m \beta_m}{R_m(1 - \beta_m \cdot \mathbf{n}_m)} \Big|_{ret}. \quad (1.29)$$

Una vez obtenidos los potenciales no hay más que utilizar (1.20) y (1.21) para obtener las expresiones para los campos eléctrico y magnético. El cálculo es ligeramente tedioso y el resultado es [31]

$$\mathbf{E}_m(\mathbf{r}, t) = q_m \left[ \frac{\mathbf{n}_m - \beta_m}{\gamma_m^2 R_m^2 (1 - \beta_m \cdot \mathbf{n}_m)^3} + \frac{\mathbf{n}_m \times [(\mathbf{n}_m - \beta_m) \times \dot{\beta}_m]}{c R_m (1 - \beta_m \cdot \mathbf{n}_m)^3} \right] \Big|_{ret}, \quad (1.30)$$

$$\mathbf{B}_m(\mathbf{r}, t) = \mathbf{n}_m \Big|_{ret} \times \mathbf{E}_m(\mathbf{r}, t), \quad (1.31)$$

con  $\dot{\beta}_m = d\beta_m/dt$  y  $\gamma_m = (1 - \beta_m^2)^{-1/2}$ . Como es bien patente, hay dos contribuciones distintas al campo eléctrico. El primer sumando en (1.30), que denotaremos  $\mathbf{E}_m^{(v)}$ , va como  $R^{-2}$  y decae rápidamente según nos alejamos de la partícula. Es el llamado campo de velocidad o campo cercano. Por el contrario, el segundo, llamado campo de aceleración o campo lejano por razones obvias, decrece como  $R^{-1}$ , es el más importante y el único que puede propagarse como una onda. Lo denotaremos  $\mathbf{E}_m^{(a)}$ . A partir de ahora vamos a prescindir de los subíndices de las partículas para aligerar la notación.

El flujo de energía viene dado el vector de Poynting,  $\mathbf{S} = c/4\pi \mathbf{E} \times \mathbf{B} = c/4\pi |\mathbf{E}|^2 \mathbf{n}$ . A partir de él puede obtenerse la potencia radiada por unidad de ángulo sólido

$$\frac{dP(t)}{d\Omega} = R^2 |\mathbf{S}(t)|. \quad (1.32)$$

Cuando la partícula se mueve a una velocidad mucho menor que la de la luz en nuestro sistema de referencia podemos aproximar el campo de aceleración por

$$\mathbf{E}^{(a)} = \frac{q}{c} \left[ \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{n} \times \dot{\boldsymbol{\beta}}}{R} \right] \Big|_{ret}, \quad (1.33)$$

y entonces

$$\frac{dP(t)}{d\Omega} = \frac{q^2}{4\pi c^3} |\dot{\mathbf{v}}|^2 \sin^2 \Theta, \quad (1.34)$$

siendo  $\Theta$  es el ángulo que forman la dirección de observación y la aceleración de la partícula. Sin más que integrar en el ángulo sólido tendremos la potencia total instantánea radiada por la carga, obteniendo la conocida expresión de Larmor en régimen no relativista [31]

$$P(t) = \frac{2}{3c^3} |\ddot{\mathbf{d}}(t)|^2, \quad (1.35)$$

donde  $\mathbf{d} = q\mathbf{r}$  es el momento dipolar de la partícula. Dado que siempre vamos a trabajar con señales de duración finita puesto que en las simulaciones (y también en el laboratorio) no tiene sentido hablar de tiempo infinito, podemos definir el espectro de potencia como

$$\sum_{n \geq 0} \mathcal{S}(\omega_n) = \frac{1}{T} \int_0^T P(t) dt, \quad (1.36)$$

donde  $T$  es el tiempo de duración de la señal y  $\omega_n = n\Delta\omega = 2\pi n/T$ . Si descomponemos la aceleración dipolar en serie de Fourier como

$$\ddot{\mathbf{d}}(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \ddot{\mathbf{d}}(\omega_n) e^{-i\omega_n t} \quad (1.37)$$

y utilizando la identidad de Parseval

$$\frac{1}{T} \int_0^T |\ddot{\mathbf{d}}(t)|^2 dt = 2 \sum_{n=0}^{\infty} |\ddot{\mathbf{d}}(\omega_n)|^2, \quad (1.38)$$

llegamos a

$$\mathcal{S}(\omega_n) = \frac{4}{3c^3} |\ddot{\mathbf{d}}(\omega_n)|^2. \quad (1.39)$$

Esta expresión, como decimos, es válida en aproximación no relativista ( $v \ll c$ ), que en el caso de una carga moviéndose en un campo electromagnético externo equivale a la aproximación dipolar, es decir, podemos usarla cuando la longitud de onda del campo es mucho mayor que las dimensiones del sistema. En esta aproximación, para obtener el espectro de emisión de un sistema y ver si es capaz de generar armónicos bastará estudiar su aceleración dipolar.

En el caso relativista los cálculos se complican bastante. La fórmula de Larmor para la potencia total emitida generalizada toma la forma [33]

$$P(t) = \frac{2q^2}{3c^3} \gamma^6 [\dot{\beta}^2 - (\boldsymbol{\beta} \times \dot{\boldsymbol{\beta}})^2]. \quad (1.40)$$

Cuando el movimiento de la partícula es periódico, el sistema sólo radía en frecuencias múltiplo de la frecuencia propia, es decir emite armónicos  $\omega_l = l\omega_0$ . En ese caso la potencia por unidad de ángulo sólido radiada en cada modo en un ciclo, suponiendo que el punto de observación está muy lejos de la zona en la que se produce la aceleración, tiene la forma [31]

$$\frac{d\mathcal{S}(\omega_l)}{d\Omega} = \frac{q^2 \omega_0^4 l^2}{(2\pi c)^3} \left| \int_0^{2\pi/\omega_0} dt \mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \mathbf{v}) e^{il\omega_0(t - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}(t)/c)} \right|^2, \quad (1.41)$$

expresión que puede usarse para calcular la potencia en cada componente armónica emitida por cargas libres en movimiento relativista. Cuando en lugar de cargas aisladas tenemos densidades de carga y corriente, habrá que sustituir  $q\mathbf{v}$  por  $\mathbf{J}$ . En el caso de medios extensos utilizaremos como espectro el módulo al cuadrado de la transformada de Fourier del campo medido a una distancia suficiente del medio, que es proporcional a  $d\mathcal{S}/d\Omega$ .

### 1.3.2 Espectro de un sistema cuántico

En el caso de un sistema cuántico la cosa es bastante más complicada y un estudio profundo excede las posibilidades de este trabajo. Aquí nos limitaremos a esbozar un tratamiento muy simple que va a permitirnos relacionar el espectro cuántico con



el de un electrón clásico [34, 35, 36]. Estudios muy completos sobre los espectros clásico y cuántico pueden encontrarse por ejemplo en las referencias [37, 38].

Partamos del hamiltoniano que describe la interacción del sistema atómico con el campo externo en aproximación dipolar

$$H = H_A + H_F - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}. \quad (1.42)$$

$H_A$  y  $H_F$  son respectivamente los hamiltonianos del átomo y del campo y  $-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$  es el término de interacción. El hamiltoniano del campo, sin incluir la energía del punto cero, es  $H_F = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar \omega_k a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}, \lambda}$ , siendo  $\omega_k = kc$ . La expresión para el operador campo eléctrico se escribe como

$$\mathbf{E} = i \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left( \frac{2\pi \hbar \omega_k}{V_0} \right)^{1/2} (a_{\mathbf{k}, \lambda} - a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger) \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}, \lambda}, \quad (1.43)$$

donde  $a_{\mathbf{k}, \lambda}$  y  $a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger$  son los operadores destrucción y creación de una onda plana con vector de ondas  $\mathbf{k}$  y polarización  $\lambda$ ,  $V_0$  es el volumen de cuantización y los vectores reales unitarios  $\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}, \lambda}$  constituyen una base de polarización lineal. El hamiltoniano (1.42) se escribe entonces como

$$H = H_A + \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar \omega_k a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}, \lambda} - i \hbar \sum_{\mathbf{k}, \lambda} C_{\mathbf{k}, \lambda} d_{k, \lambda} (a_{\mathbf{k}, \lambda} - a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger), \quad (1.44)$$

con  $C_{\mathbf{k}, \lambda} = (2\pi \omega_k / \hbar V_0)^{1/2}$  y  $d_{k, \lambda} = \mathbf{d} \cdot \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}, \lambda}$ . Utilizando las ecuaciones de movimiento de Heisenberg, la evolución del operador destrucción vendrá dada por

$$i \hbar \frac{da_{\mathbf{k}, \lambda}}{dt} = [a_{\mathbf{k}, \lambda}, H] \quad (1.45)$$

Es fácil ver entonces que

$$\dot{a}_{\mathbf{k}, \lambda} = -i \omega_k a_{\mathbf{k}, \lambda} + C_{\mathbf{k}, \lambda} d_{k, \lambda}, \quad (1.46)$$

ecuación que puede resolverse de manera formal para obtener

$$a_{\mathbf{k}, \lambda}(t) = a_{\mathbf{k}, \lambda}(0) e^{-i \omega_k t} + C_{\mathbf{k}, \lambda} \int_0^t d_{k, \lambda}(t') e^{i \omega_k (t' - t)} dt'. \quad (1.47)$$

Sin más que tomar complejos conjugados se obtiene la ecuación correspondiente al operador creación. El intercambio de energía del sistema con el campo durante el tiempo de interacción vendrá dado por

$$\frac{1}{T} \int_0^T dt P(t) = \frac{1}{T} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \hbar \omega_k \langle a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger(t) a_{\mathbf{k}, \lambda}(t) \rangle. \quad (1.48)$$

El número de fotones en el modo  $(\mathbf{k}, \lambda)$ , utilizando (1.47), será

$$\begin{aligned} \langle a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger(t) a_{\mathbf{k}, \lambda}(t) \rangle &= \langle a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger(0) a_{\mathbf{k}, \lambda}(0) \rangle \\ &+ 2\text{Re} \left[ C_{\mathbf{k}, \lambda} \int_0^t \langle a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger(0) d_{\mathbf{k}, \lambda}(t') \rangle e^{-i\omega_k t'} dt' \right] \\ &+ |C_{\mathbf{k}, \lambda}|^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \langle d_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger(t') d_{\mathbf{k}, \lambda}(t'') \rangle e^{i\omega_k(t''-t')}. \end{aligned} \quad (1.49)$$

Es claro que el primer término representa el número de fotones en el momento inicial y será nulo si al inicio de la interacción los modos correspondientes están desexcitados. En cuanto al segundo sumando, corresponde a la absorción o emisión estimulada en el modo  $(\mathbf{k}, \lambda)$ , es decir, en la misma frecuencia y polarización del campo externo. Si dicho modo es inicialmente un estado coherente  $|\alpha_{\mathbf{k}, \lambda}\rangle$  tendremos que  $\alpha_{\mathbf{k}, \lambda} |\alpha_{\mathbf{k}, \lambda}\rangle = \alpha^{(\mathbf{k}, \lambda)} |\alpha_{\mathbf{k}, \lambda}\rangle$  y entonces

$$2\text{Re} \left[ C_{\mathbf{k}, \lambda} \int_0^t \langle \alpha_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger(0) d_{\mathbf{k}, \lambda}(t') \rangle e^{-i\omega_k t'} dt' \right] = 2\text{Re} \left[ \alpha^{(\mathbf{k}, \lambda)} C_{\mathbf{k}, \lambda} \int_0^t \langle d_{\mathbf{k}, \lambda}(t') \rangle e^{-i\omega_k t'} dt' \right]. \quad (1.50)$$

Por tanto el valor esperado de la proyección del dipolo en la dirección de polarización del campo nos da el espectro de absorción o emisión estimulada. Evidentemente, este término también se anula si inicialmente el modo  $|\alpha_{\mathbf{k}, \lambda}\rangle$  está desexcitado, así que el único término que nos interesa es el tercero, resultante del escáterin y la emisión espontánea y que depende de la función de correlación del dipolo:

$$\langle a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger(t) a_{\mathbf{k}, \lambda}(t) \rangle^{(S)} = |C_{\mathbf{k}, \lambda}|^2 \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \langle d_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger(t') d_{\mathbf{k}, \lambda}(t'') \rangle e^{i\omega_k(t''-t')} \quad (1.51)$$

Muchas veces se hace la aproximación  $\langle \mathbf{d}^\dagger(t') \cdot \mathbf{d}(t) \rangle \simeq \langle \mathbf{d}^\dagger(t') \rangle \cdot \langle \mathbf{d}(t) \rangle$  y entonces el espectro se calcula con

$$\langle a_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger(t) a_{\mathbf{k},\lambda}(t) \rangle^{(S)} \approx |C_{\mathbf{k},\lambda}|^2 \left| \int_0^t dt' \langle d_{\mathbf{k},\lambda}(t') \rangle e^{i\omega_k t'} \right|^2. \quad (1.52)$$

La aproximación sólo está justificada si pensamos en un sistema de  $N$  átomos en lugar de en uno aislado. En ese caso  $d_{\mathbf{k},\lambda} = \sum_i d_{\mathbf{k},\lambda,i}$  y tendremos que (1.51) se convierte en

$$\langle a_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger(t) a_{\mathbf{k},\lambda}(t) \rangle^{(S)} = |C_{\mathbf{k},\lambda}|^2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \langle d_{\mathbf{k},\lambda,i}^\dagger(t') d_{\mathbf{k},\lambda,j}(t'') \rangle e^{i\omega_k(t''-t')}. \quad (1.53)$$

Si los distintos átomos están lo suficientemente separados podremos despreciar la interacción entre ellos, verificándose  $\langle d_{\mathbf{k},\lambda,i}^\dagger(t') d_{\mathbf{k},\lambda,j}(t'') \rangle = \langle d_{\mathbf{k},\lambda,i}^\dagger(t') \rangle \langle d_{\mathbf{k},\lambda,j}(t'') \rangle$  para  $i \neq j$ . Tendremos entonces que  $\langle a_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger(t) a_{\mathbf{k},\lambda}(t) \rangle^{(S)} = C_N^{(S)} + I_N^{(S)}$  con

$$\begin{aligned} C_N^{(S)} &= |C_{\mathbf{k},\lambda}|^2 \sum_{i,j=1, i \neq j}^N \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \langle d_{\mathbf{k},\lambda,i}^\dagger(t') \rangle \langle d_{\mathbf{k},\lambda,j}(t'') \rangle e^{i\omega_k(t''-t')} \\ &\simeq N^2 |C_{\mathbf{k},\lambda}|^2 \left| \int_0^t dt' \langle d_{\mathbf{k},\lambda,i}^\dagger(t') \rangle e^{-i\omega_k t'} \right|. \end{aligned} \quad (1.54)$$

$$\begin{aligned} I_N^{(S)} &= |C_{\mathbf{k},\lambda}|^2 \sum_{i=1}^N \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \langle d_{\mathbf{k},\lambda,i}^\dagger(t') d_{\mathbf{k},\lambda,i}(t'') \rangle e^{i\omega_k(t''-t')} \\ &\simeq N |C_{\mathbf{k},\lambda}|^2 \int_0^t dt'' \langle d_{\mathbf{k},\lambda,i}^\dagger(t'') d_{\mathbf{k},\lambda,i}(t'') \rangle e^{i\omega_k(t''-t')}, \end{aligned} \quad (1.55)$$

donde hemos supuesto que todos los átomos ven el mismo campo, esto es, que la aproximación dipolar sigue siendo válida. Cuando el número de átomos es alto, la parte  $C_N^{(S)}$ , llamada coherente, es mucho mayor que la incoherente,  $I_N^{(S)}$ , teniendo sentido entonces hallar el espectro a partir del valor esperado del momento dipolar y no de su correlación. La importancia del término incoherente ha sido estudiada para átomos de dos niveles [39] e hidrogenoides [40], pero aquí no vamos a entrar en ello. Con esta aproximación y utilizando (1.48) tendremos

$$\frac{1}{T} \int_0^T dt P(t)^{(S)} = \sum_{\mathbf{k},\lambda} \frac{2\pi\omega_k^2}{V_0} \int_0^T dt' \int_0^T dt'' \langle d_{\mathbf{k},\lambda}^\dagger(t') \rangle \langle d_{\mathbf{k},\lambda}(t'') \rangle e^{i\omega_k(t''-t')}. \quad (1.56)$$

Definiendo las componentes de Fourier del dipolo como

$$\tilde{\mathbf{d}}_{\mathbf{k},\lambda}(\omega_k) = \frac{1}{T} \int_0^T dt e^{-i\omega_k t} \langle \mathbf{d}_{\mathbf{k},\lambda}(t) \rangle, \quad (1.57)$$

y transformando la suma sobre los vectores de onda en el espacio recíproco en suma sobre las frecuencias integrando en el ángulo sólido

$$\sum_{\mathbf{k}} = \sum_n \int \frac{k^2 d\Omega}{\left(\frac{2\pi}{L_0}\right)^2}, \quad (1.58)$$

llegamos a

$$\frac{1}{T} \int_0^T dt P(t)^{(S)} = \sum_{n \geq 0} \frac{\omega_n^2}{2\pi c^3} \int d\Omega \sum_{\lambda} |\tilde{\mathbf{d}}_{n,\lambda}(\omega_n)|^2, \quad (1.59)$$

donde hemos usado que la longitud de cuantización es  $L_0 = V_0^{1/3} = cT$ , puesto que  $\Delta k = \Delta\omega/c$ . Integrando en el ángulo sólido y sumando a las dos polarizaciones tenemos que

$$\frac{1}{T} \int_0^T dt P(t)^{(S)} = \sum_{n \geq 0} \mathcal{S}(\omega_n) = \sum_{n \geq 0} \frac{4}{3c^3} \omega_n^4 |\tilde{\mathbf{d}}(\omega_n)|^2. \quad (1.60)$$

Para una señal armónica se verifica que  $\ddot{\mathbf{d}}(\omega) = \omega^2 \tilde{\mathbf{d}}(\omega)$  y recuperamos la expresión clásica (1.39). En este caso la aceleración dipolar es la derivada segunda del valor esperado del operador momento dipolar. En el caso general, y debido a que en la práctica, como hemos dicho, no puede calcularse un espectro integrando hasta tiempo infinito sino hasta un tiempo máximo  $T$ , se verifica trivialmente que

$$\int_0^T e^{-i\omega t} \ddot{\mathbf{d}}(t) dt = e^{-i\omega T} \dot{\mathbf{d}}(T) + i\omega e^{i\omega T} \mathbf{d}(T) - \omega^2 \int_0^T e^{-i\omega t} \mathbf{d}(t) dt, \quad (1.61)$$

por lo que cuando el dipolo y su velocidad se anulen en  $t = T$ , la diferencia entre el espectro calculado con la aceleración dipolar y el calculado con el dipolo será el factor  $\omega^4$  pero en general esto no será así, especialmente cuando hay una ionización considerable, puesto que en ese caso el dipolo será bastante grande al final del cálculo. Por ello se utiliza la aceleración dipolar en lugar del dipolo, aplicando

habitualmente el teorema de Ehrenfest [41, 42, 43] y hallando la aceleración dipolar mediante

$$\ddot{\mathbf{d}}(t) = \langle -\nabla H \rangle. \quad (1.62)$$

En este trabajo, cuando hablemos de espectros atómicos, utilizaremos la expresión análoga a la clásica (1.39) sin el prefactor. En el caso del sistema de dos niveles el cálculo es muy sencillo. Cuando comparemos con espectros del átomo de hidrógeno, la aceleración dipolar se hallará con (1.62).

## 1.4 Generación de armónicos en átomos

Vamos a repasar ahora las principales características del espectro de armónicos generado por un átomo de hidrógeno en presencia de un pulso láser intenso. Elegimos el hidrógeno por un motivo fundamental: es el único sistema *real* que ha podido simularse hasta ahora de forma exacta resolviendo la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Recientemente ha habido intentos de resolver el siguiente átomo en complejidad, el de helio, pero para rangos muy restringidos de los parámetros del campo y con grandes dificultades [44, 45]. Por supuesto, los resultados del hidrógeno son extrapolables automáticamente a los demás iones hidrogenoides sin más que reescalar las variables atómicas, y en principio a cualquier sistema atómico en el que la aproximación de un único electrón activo funcione correctamente (los metales alcalinos especialmente). En cualquier caso, las características generales del espectro de armónicos del hidrógeno se han observado también en multitud de experimentos con distintos gases. Los espectros que vamos a mostrar en este capítulo se han calculado con un pulso de forma trapezoidal de longitud diez ciclos ópticos tal y como puede verse en la figura 1.2. Cuando hablemos de la amplitud del campo nos referiremos a la zona de envolvente constante, que es la única que consideramos para calcular los espectros.

Comencemos por el caso en el que el campo es tan poco intenso que la io-

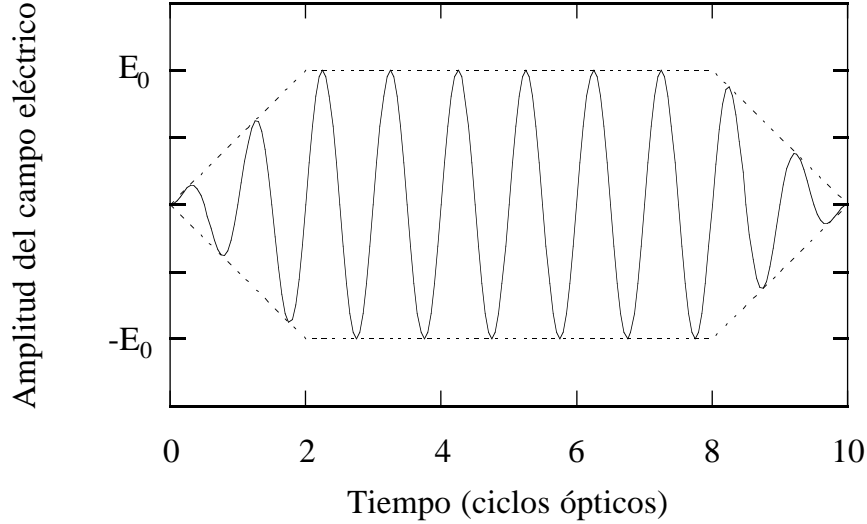


Figura 1.2: Esquema de la forma del pulso láser utilizado en el cálculo de los espectros.

nización es despreciable. En esta situación sólo serán relevantes las transiciones entre estados ligados. La generación de armónicos se produce cuando el electrón absorbe un número  $K$  de fotones para pasar de un estado inicial  $|i\rangle$  a otro final  $|f\rangle$  a través de estados intermedios virtuales, tal y como explicábamos en la sección 1.1 y esquematizamos en la figura 1.3. Como el estado excitado no es estable, el electrón volverá a desexcitarse emitiendo un sólo fotón de energía  $K\omega_0$ . Debido a la simetría del potencial coulombiano el número  $K$  deberá ser impar pues en otro caso la transición no estará permitida. La intensidad relativa de los armónicos en general irá decreciendo dependiendo de los parámetros del campo. La existencia de estados intermedios (o finales) resonantes con la frecuencia del láser puede hacer que esto no sea siempre así.

En la figura 1.4 podemos ver un espectro de armónicos típico de las transiciones multifotónicas entre estados ligados. Son visibles unos pocos armónicos junto a otras frecuencias relevantes determinadas por las distintas resonancias.

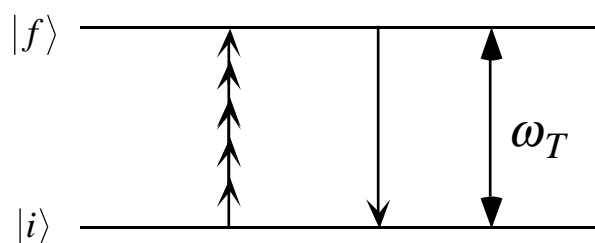


Figura 1.3: Esquema del proceso de generación de armónicos entre estados ligados.

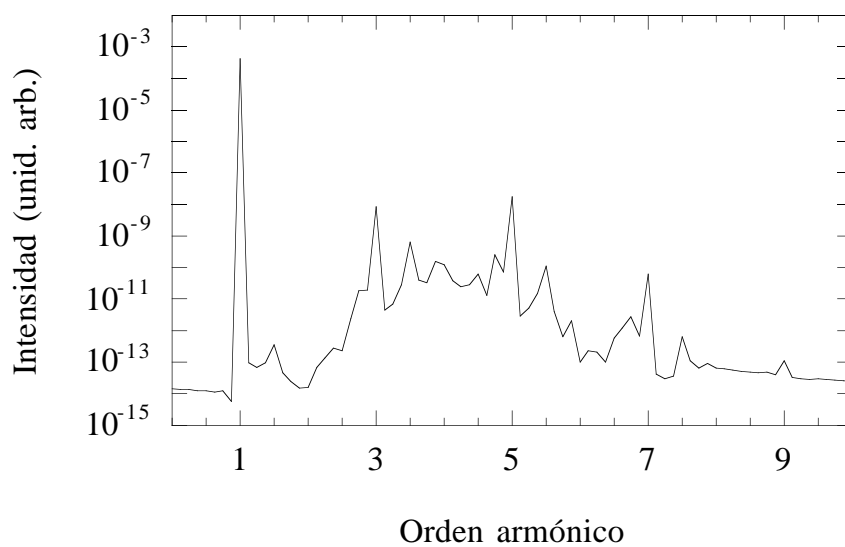


Figura 1.4: Espectro de armónicos del hidrógeno en el caso de un pulso con frecuencia  $\omega_0 = 0.1$  u.a. y amplitud  $E_0 = 0.02$  u.a.

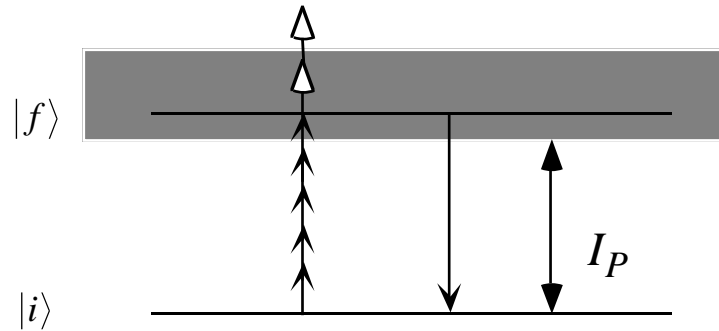


Figura 1.5: Esquema del proceso de generación de armónicos en régimen de ionización multifotónica. Los fotones representados con flechas blancas indican la posibilidad de ionización sobre umbral.

Si nos vamos al régimen de ionización multifotónica el mecanismo será muy parecido, pero en este caso la energía de la transición será mayor que el potencial de ionización y el estado superior no será un estado ligado sino uno del continuo. El esquema será el de la figura 1.5. En este caso la cantidad de armónicos visibles así como su intensidad dependerán fundamentalmente de la amplitud del campo eléctrico: cuanto mayor sea ésta, mayor probabilidad tendrán los distintos canales de ionización sobre-umbral y por tanto los armónicos más altos. En la figura 1.6 podemos ver un ejemplo de espectro en régimen multifotónico. El aspecto es muy parecido al caso en que no hay ionización pero los picos son bastante más intensos y la importancia relativa de las resonancias intermedias es mucho menor. Los armónicos a partir del séptimo corresponden a procesos sobre umbral cada vez menos probables.

Como ya sabemos, la dinámica en el caso del régimen de ionización por túnel es diferente a la del multifotónico y esto va a repercutir en el espectro de armónicos. Su forma tiene unas características peculiares, observadas en los experimentos y en las primeras simulaciones realizadas por Krause y otros [42]. Puede haber unos cuantos armónicos de orden bajo cuyas intensidades decrezcan exponencialmente siguiendo las leyes perturbativas, a continuación de los cuales aparece una amplia



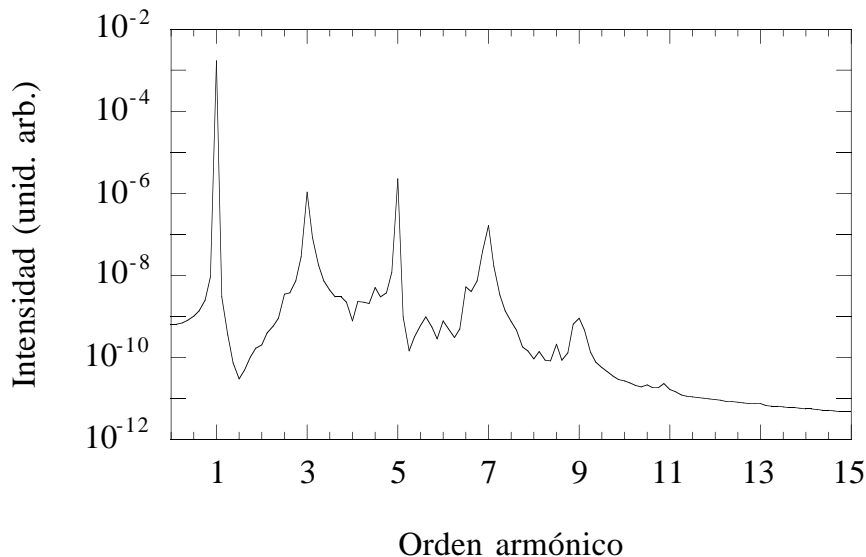


Figura 1.6: Espectro de armónicos del hidrógeno en el caso de un pulso con frecuencia  $\omega_0 = 0.1$  u.a. y amplitud  $E_0 = 0.04$  u.a.

región de armónicos de intensidad parecida, que llamaremos meseta (*plateau* en la literatura) y que finaliza de forma abrupta a una determinada frecuencia de corte que sigue la ley empírica

$$\omega_{co} = I_p + 3.17U_p. \quad (1.63)$$

A partir de dicha frecuencia la intensidad de los armónicos decae rápidamente y apenas son visibles. En la figura 1.7 observamos un caso de espectro en el régimen de ionización por túnel. La diferencia con los casos anteriores resulta patente.

Observando la expresión (1.63), resulta claro que podríamos aumentar la frecuencia máxima disminuyendo todo lo posible la frecuencia del campo y aumentando su intensidad. En efecto, como ya hemos mencionado han sido observados armónicos por encima del orden 150 para longitudes de onda incidentes en el rango del visible. A pesar de todo, y por desgracia, este proceso no es la panacea universal. En primer lugar, si intentamos aumentar mucho la intensidad del pulso láser sabemos que iremos al régimen de supresión de barrera. En este caso la frecuencia

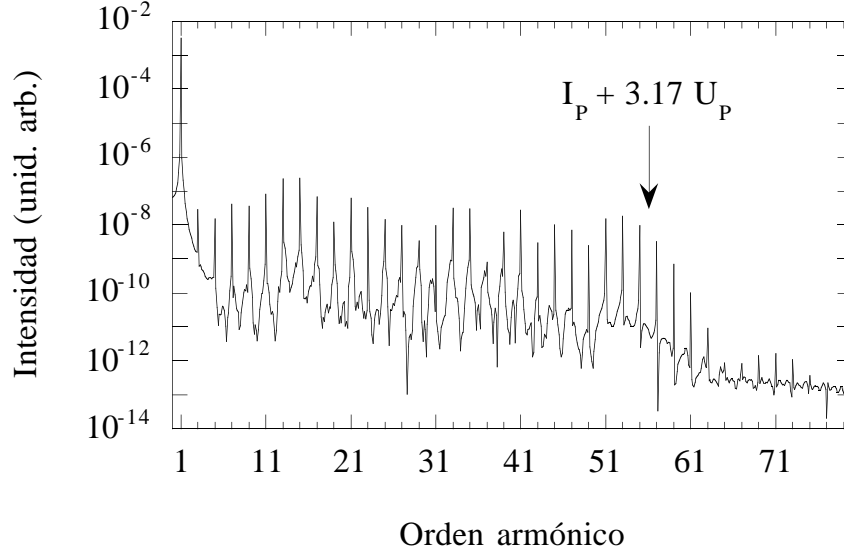


Figura 1.7: Espectro de armónicos del hidrógeno en el caso de un pulso con frecuencia  $\omega_0 = 0.04$  u.a. y amplitud  $E_0 = 0.06$  u.a. La flecha indica la posición de la frecuencia dada por (1.63).

máxima no sigue la ley (1.63) y, lo que es más grave, la visibilidad de los armónicos resulta seriamente deteriorada, tal y como podemos ver en la figura 1.8. En segundo lugar, y no menos importante, los armónicos emitidos por cada átomo en general no van a sumarse coherentemente sino que debido a efectos de desajuste de fase van a perderse en el proceso de propagación. Como veremos, estos desajustes serán tanto mayores cuanto más denso sea el medio y por tanto la observación de estos armónicos altos sólo será posible en medios muy tenues y, por consiguiente, con una eficiencia baja.

Para explicar este comportamiento extraño de los armónicos generados en el régimen de túnel han aparecido en los últimos años varias teorías. Aquí vamos a recordar las dos que, con innumerables añadidos posteriores, han tenido más éxito y ofrecen una mejor comprensión del fenómeno físico. Serán además en las que nos apoyaremos cuando estudiemos el efecto de las transiciones entre estados ligados

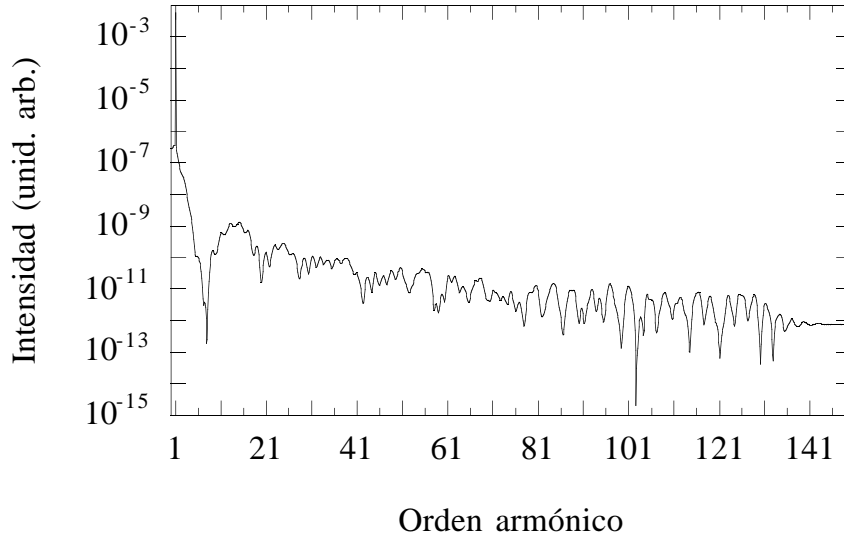


Figura 1.8: Espectro de armónicos del hidrógeno en el caso de un pulso con frecuencia  $\omega_0 = 0.04$  u.a. y amplitud  $E_0 = 0.15$  u.a. La frecuencia máxima en este caso apenas llega a  $1.6U_p$ .

en el régimen de túnel.

### 1.4.1 Modelo clásico

Suele conocerse en la literatura como modelo del *hombre ingenuo* (*simple man's model* en inglés) y se trata del más sencillo de los modelos posibles. En esencia consiste en suponer que una vez que una parte del paquete de ondas electrónico se ha ionizado, se comporta como si fuera una partícula clásica sometida únicamente al campo electromagnético externo, despreciando tanto el efecto del potencial coulombiano como la fenomenología propia de un paquete de ondas cuántico (difusión, efectos coherentes, etc.) Este modelo fue propuesto por van Linden y Muller [46], y Gallagher [47] para estudiar la ionización sobre umbral y utilizado por Corkum [48], y Kulander y Schafer [49] para explicar la meseta en los armónicos generados en el régimen de túnel.

Supongamos pues que tenemos una partícula ionizada en el instante  $t_0$  sometida a un campo externo monocromático y linealmente polarizado en la dirección  $x$ . Las ecuaciones de evolución clásicas serán

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -E_0 \sin(\omega_0 t) \quad (1.64)$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{E_0}{\omega_0} [\cos(\omega_0 t) - \cos(\omega_0 t_0)] + v_0(t_0) \quad (1.65)$$

$$\begin{aligned} x &= -\frac{E_0}{\omega_0^2} [\omega_0(t - t_0) \cos(\omega_0 t_0) + \sin(\omega_0 t_0) - \sin(\omega_0 t)] \\ &+ v_0(t_0)(t - t_0) + x_0(t_0). \end{aligned} \quad (1.66)$$

Hemos despreciado los efectos relativistas (campo magnético y término de masa) puesto que en el régimen de túnel la intensidad del campo es tan pequeña que son apenas perceptibles. Podemos ver que la velocidad incluye dos términos, uno de deriva,  $v_d = v_0(t_0) - E_0/\omega_0 \cos(\omega_0 t_0)$  y otro ponderomotriz,  $v_p = E_0/\omega_0 \cos(\omega_0 t)$ , que describe la oscilación en el seno del campo externo. Debido a esto la trayectoria depende fuertemente de la fase del campo eléctrico en el momento de la ionización,  $\omega_0 t_0$ . Habrá partículas que vuelvan a la posición inicial una, varias o ninguna vez. Las que lo hagan habrán adquirido una determinada energía cinética del campo. Lo que este modelo propone es que en la recesión con el núcleo atómico hay una probabilidad de que la partícula se recombine y decaiga al estado fundamental emitiendo un fotón cuya energía sea precisamente la de la partícula: la cinética más la potencial (el potencial de ionización). Para calcular la energía cinética en el momento de la recesión podemos suponer que en el régimen de túnel la velocidad inicial es cero al tratarse de un proceso adiabático y ser el valor esperado de la velocidad en el estado inicial nulo. La posición inicial  $x_0(t_0)$  vendrá dada por la forma de la barrera de potencial, pero en primera aproximación podemos también suponer que es muy pequeña en comparación con la excursión que experimentará el electrón y hacer  $x_0(t_0) \simeq 0$ . En este caso basta buscar las soluciones  $x(t) = 0$ ,  $t > t_0$  en (1.66) y hallar  $T(t) = v^2(t)/2$ .

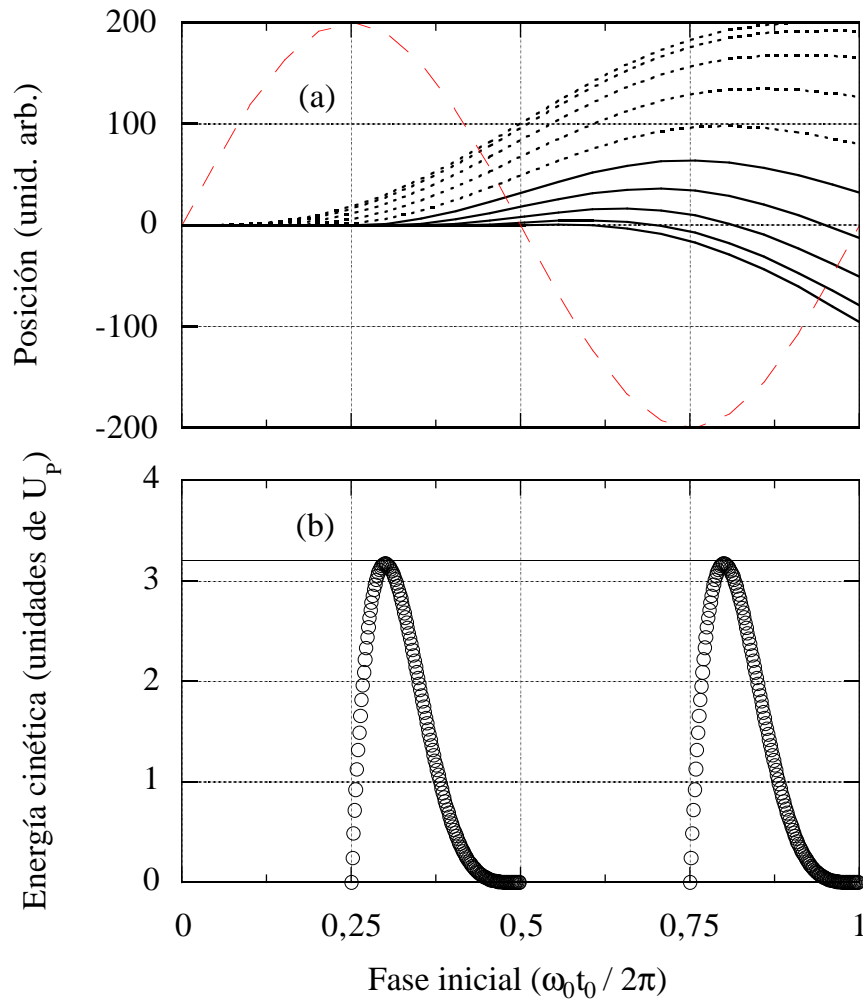


Figura 1.9: Trayectorias de las partículas ionizadas en función de la fase inicial (a). En línea continua se representan las trayectorias que vuelven a cruzar por  $x = 0$ , en línea de puntos las que no vuelven nunca. La línea de trazos representa la amplitud del campo eléctrico. En la gráfica (b) representamos las energías cinéticas en el momento de la primera recollisión de las partículas que regresan.

En la figura 1.9a hemos representado las trayectorias de las partículas ionizadas en medio ciclo en función de la fase inicial. Puede observarse cómo solamente regresan a  $x = 0$  aquellas que abandonan el átomo con fases iniciales  $\omega_0 t_0 \in [\pi/2, \pi] \cup [3\pi/2, 2\pi]$ . En la figura 1.9b podemos ver la energía cinética en el momento de la primera recolisión de las partículas que vuelven. El máximo de energía toma un valor que nos es familiar,  $T_M = 3.17U_p$ , precisamente para  $\omega_0 t_0 \simeq 107^\circ, 287^\circ$ . En sucesivas recoliciones esta energía cinética máxima no aumenta.

Vemos por lo tanto que una imagen clásica tan sencilla nos ofrece una primera explicación de qué es lo que está ocurriendo para que se generen armónicos tan altos en el régimen de túnel. El modelo es extrapolable a regímenes diferentes. En el caso de la ionización multifotónica la diferencia es que ya no podemos considerar nula la velocidad inicial sino que ésta vendrá dada por el exceso de energía tomada del campo,  $v_0(t_0) = [2(K\omega_0 - I_p - U_p)]^{1/2}$ . Debido a esta nueva contribución a la velocidad de deriva las trayectorias estarán desplazadas y habrá menos partículas que vuelvan con energía cinética alta. Si a esto añadimos que en este régimen la energía ponderomotriz es mucho menor en número de fotones, vemos que será bastante más difícil obtener armónicos de orden muy alto. La única posibilidad es aumentar la intensidad del campo y conseguir que la probabilidad de las ionizaciones sobre umbral a muchos fotones sean elevadas, aunque en este caso también decrece la probabilidad de que los electrones vuelvan al núcleo. En cuanto al caso de supresión de barrera, los electrones ionizados antes de que el campo baje el potencial hasta su nivel de energía (bien por túnel o bien por absorción multifotónica) se comportan tal y como hemos explicado. A partir de ese momento todos quedarán libres de forma instantánea y tendrán muy poca probabilidad de retornar al núcleo. Esto explica la disminución en intensidad y número de los armónicos altos en el régimen de supresión de barrera [50].

### 1.4.2 Modelo cuántico

Es indudable que el modelo del *hombre ingenuo* resulta muy atractivo porque ofrece una explicación sencilla y comprensible del mecanismo de generación de armónicos durante la ionización atómica. Pese a todo, no podemos olvidar las muchas limitaciones que lo hacen insatisfactorio y que provienen de su naturaleza puramente clásica. Un modelo cuántico mucho más convincente fue propuesto en 1994 por Lewenstein y otros [51]. Este modelo resuelve la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo del sistema atómico partiendo de cuatro aproximaciones: (a) considera que el único estado ligado relevante es el fundamental, negando el efecto del resto; (b) supone que la pérdida de población en el estado fundamental debida a la ionización es despreciable; (c) el electrón en el continuo se comporta como un paquete de ondas libre sometido al campo externo, negando el efecto del potencial atómico y (d) se desprecia el efecto de las transiciones entre estados del continuo de distinta energía. Estas cuatro aproximaciones limitan bastante la validez del modelo. Respecto a la tercera, es equivalente a la teoría de Keldysh, Faisal y Reiss que ya hemos comentado y podemos aceptarla siempre que la energía ponderomotriz sea lo suficientemente grande, por ejemplo en el régimen de túnel. Si nos restringimos a dicho régimen la cuarta tiene bastante sentido, pero deja de ser aceptable en el caso de la ionización sobre umbral. La (a) es bastante cuestionable y es uno de los puntos a los que intentaremos dar respuesta en este trabajo. Lo mismo ocurre con la (b), que en principio parece poco aceptable cuando precisamente estamos estudiando regímenes de ionización. En el trabajo original se corrige el modelo introduciendo la ionización mediante una tasa de ionización constante y viendo que en este caso la generación de armónicos no cambia demasiado. También estudiaremos esto más adelante. Para empezar, aceptemos las cuatro condiciones

y pensemos que la función de onda electrónica puede ser expresada como

$$|\psi(t)\rangle = e^{iI_p t} \left( a(t)|0\rangle + \int d\mathbf{v} b(\mathbf{v}, t)|\mathbf{v}\rangle \right), \quad (1.67)$$

donde  $a(t) \simeq 1$  es la amplitud del estado fundamental,  $b(\mathbf{v}, t)$  las de los estados del continuo y la exponencial representa las oscilaciones del estado fundamental con su frecuencia propia  $I_p$ . La ecuación de Schrödinger en aproximación dipolar en el gauge de la posición nos dice que

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \left[ -\frac{1}{2}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) - E \sin(t)x \right] |\psi(t)\rangle, \quad (1.68)$$

donde suponemos que el campo está linealmente polarizado en la dirección  $x$  y las unidades de frecuencia y energía son las del campo. Introduciendo (1.67) en (1.68) llegamos a

$$\dot{b}(\mathbf{v}, t) = -i\left(\frac{\mathbf{v}^2}{2} + I_p\right)b(\mathbf{v}, t) - E \sin(t) \frac{\partial b(\mathbf{v}, t)}{\partial v_x} + iE \sin(t) d_x(\mathbf{v}), \quad (1.69)$$

siendo  $\mathbf{d}(\mathbf{v}) = \langle \mathbf{v} | \mathbf{r} | 0 \rangle$  el elemento de matriz dipolar de la transición cuya componente a lo largo de la dirección de polarización del campo es  $d_x(\mathbf{v})$  y que reúne toda la información que nos interesa sobre el átomo. La ecuación (1.69) puede resolverse de manera formal como ya sabemos:

$$b(\mathbf{v}, t) = i \int_0^t dt' E \sin(t') d_x(\mathbf{v} + \mathbf{A}(t) - \mathbf{A}(t')) \\ \times \exp\left\{ -i \int_{t'}^t dt'' \left[ (\mathbf{v} + \mathbf{A}(t) - \mathbf{A}(t''))^2 / 2 + I_p \right] \right\}. \quad (1.70)$$

$\mathbf{A}(t) = E \cos(t)\hat{x}$  es el potencial vector del campo. Introduciendo (1.70) en (1.68) podemos hallar el momento dipolar haciendo uso de la aproximación (d)

$$x(t) = \langle \psi(t) | x | \psi(t) \rangle = 2Re \int d\mathbf{v} d\mathbf{v}^* (\mathbf{v}) b(\mathbf{v}, t) \\ = 2Re \left[ i \int_0^t dt' \int d\mathbf{p} E \sin(t') d_x(\mathbf{p} - \mathbf{A}(t')) d_x^*(\mathbf{p} - \mathbf{A}(t)) e^{[-iS(\mathbf{p}, t, t')]} \right], \quad (1.71)$$

donde hemos introducido el momento canónico  $\mathbf{p} = \mathbf{v} + \mathbf{A}(t)$  y la integral de acción

$$S(\mathbf{p}, t, t') = \int_{t'}^t dt'' \left( \frac{[\mathbf{p} - \mathbf{A}(t'')]^2}{2} + I_p \right). \quad (1.72)$$



La interpretación de (1.71) es la siguiente:  $E \sin(t') d_x(\mathbf{p} - \mathbf{A}(t'))$  es la amplitud de probabilidad de que el electrón pase del estado fundamental a uno del continuo con momento canónico  $\mathbf{p}$  en el instante  $t'$ . El paquete de ondas se propaga entonces en el seno del campo adquiriendo una fase dada por la exponencial compleja de la acción  $S(\mathbf{p}, t, t')$  sin variar su momento canónico (despreciamos el efecto del potencial atómico). Finalmente, el electrón se recombina en el instante  $t'$  con una amplitud de probabilidad dada por  $d_x^*(\mathbf{p} - \mathbf{A}(t))$ .

Para resolver la integral sobre el momento en (1.71) volvemos a utilizar el método del punto de ensilladura. La justificación está en que los momentos dipolares varían mucho más lentamente que la acción clásica y por tanto podemos aproximar el valor de la integral a la contribución de los puntos en que el gradiente (en  $\mathbf{p}$ ) de ésta se anula, que son precisamente aquellos en que el electrón ionizado en tiempo  $t'$  vuelve a la misma posición en el instante  $t$ :

$$\nabla_{\mathbf{p}} S(\mathbf{p}, t, t') = \mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(t') = 0. \quad (1.73)$$

Por otro lado, es evidente que  $\mathbf{r}(t)$  debe estar muy cercano al origen para que las transiciones puedan producirse. Esto se comprueba cuando tomamos el momento dipolar  $d_x(\mathbf{p} - \mathbf{A}(t'))$  calculado para el potencial coulombiano y vemos que su transformada de Fourier está localizada en torno al núcleo en la escala del radio de Bohr. Justificamos de este modo el resultado del modelo del *hombre sencillo*, al ser la contribución de los electrones que escapan del núcleo y vuelven a él tras oscilar en el campo externo la más importante en el momento dipolar y por tanto en la generación de armónicos. Con estas consideraciones, el resultado para el dipolo es

$$x(t) = 2Re \left[ i \int_0^\infty d\tau \left( \frac{\pi}{\epsilon + i\tau/2} \right)^{3/2} d_x^*(p_{est}(t, \tau) - A_x(t)) \right. \\ \left. d_x(p_{est}(t, \tau) - A_x(t - \tau)) E \sin(t - \tau) \exp[-iS_{est}(t, \tau)] \right]. \quad (1.74)$$

En la expresión anterior se ha introducido el tiempo de retorno  $\tau = t - t'$ , los

valores estacionarios de la componente  $x$  del momento

$$p_{est}(t, \tau) = E[\sin(t) - \sin(t - \tau)]/\tau \quad (1.75)$$

y de la acción semiclassical

$$\begin{aligned} S_{est}(t, \tau) &= \frac{1}{2} \int_{t-\tau}^t dt'' (\mathbf{p}_{est} - \mathbf{A}(t'')) \\ &= (I_p + U_p)\tau - 2U_p[1 - \sin(\tau)]/\tau - U_p C(\tau) \sin(2t - \tau), \end{aligned} \quad (1.76)$$

siendo  $C(\tau) = \cos(\tau) - 4 \cos^2(\tau/2)/\tau$ . El factor  $[\pi/(\epsilon + i\tau/2)]^{3/2}$  indica el efecto del ensanchamiento del paquete de ondas durante su excursión en el continuo. Para estudiar el espectro de emisión del átomo hay que hallar las componentes de Fourier del dipolo, definidas como

$$x_{2K+1} = \frac{1}{2\pi} \int_{t_0}^{t_0+2\pi} dt x(t) e^{(2K+1)it}. \quad (1.77)$$

Las componentes pares serán nulas debido a la simetría del potencial. Para calcular cada componente habrá que resolver una doble integral en las variables  $t$  y  $\tau$  -véanse (1.74) y (1.77)-. Dichas integrales pueden calcularse una vez más por el método del punto de ensilladura, que será tanto mejor aproximación cuanto mayores sean la energía ponderomotriz, el potencial de ionización y el orden armónico  $K$ . Si aplicamos este método obtenemos dos condiciones añadidas a la ya conocida (1.73)

$$\frac{\partial S(\mathbf{p}, t, \tau)}{\partial \tau} = \frac{[\mathbf{p} - \mathbf{A}(t - \tau)]^2}{2} + I_p = 0, \quad (1.78)$$

$$\frac{\partial S(\mathbf{p}, t, \tau)}{\partial t} = \frac{[\mathbf{p} - \mathbf{A}(t)]^2}{2} - \frac{[\mathbf{p} - \mathbf{A}(t - \tau)]^2}{2} = 2K + 1. \quad (1.79)$$

La primera de estas nuevas condiciones, si  $I_p$  fuera cero, lo que nos dice es que la velocidad inicial del electrón cuando abandona el núcleo debe ser cero,  $v(t - \tau) = p_{est}(t, \tau) - A(t - \tau) = 0$ . El potencial de ionización no es cero, lo que implica que para atravesar la barrera el electrón debe tener una energía cinética

negativa en el instante  $t - \tau$ . Este problema queda resuelto si pensamos en un  $\tau$  complejo, cuya parte imaginaria sería el tiempo de túnel (tiempo que tarda el electrón en atravesar la barrera). De cualquier modo, en el régimen de túnel el potencial de ionización es mucho menor que la energía ponderomotriz y podemos suponer que la velocidad de partida es muy pequeña, recuperando así otra de las condiciones básicas en el modelo clásico, en el que imponíamos que la velocidad inicial de los electrones ionizados fuera cero. Por su parte, la condición (1.79) no es más que la ley de conservación de la energía, como observamos sin más que sustituir en ella (1.78). Lo que nos dice por tanto esta expresión es que la máxima frecuencia emitida viene dada por la energía cinética máxima del electrón en el momento de la recesión, tal y como proponía el modelo clásico. En realidad, para obtener la ley que nos da la frecuencia de corte habría que resolver de manera exacta el sistema de ecuaciones que definen las tres condiciones de punto de ensilladura sobre las variables  $\mathbf{p}$ ,  $t$  y  $\tau$  -ecuaciones (1.73), (1.78) y (1.79)-. Analíticamente esto es bastante complicado pero numéricamente es posible hacerlo. El resultado es ligeramente distinto al fenomenológico:

$$(2K + 1)_{max} = 3.17U_p + F(I_p/U_p)I_p. \quad (1.80)$$

El factor  $F(I_p/U_p)$  toma el valor 1.32 cuando  $I_p/U_p \simeq 0$  y va decreciendo cuando ese cociente aumenta. La diferencia con el valor predicho clásicamente es por tanto muy pequeña y puede deberse a varios factores: por un lado el electrón no se ioniza exactamente en  $x = 0$  puesto que tiene que atravesar la barrera de potencial; además el paquete de ondas se va expandiendo y esto hace que baje ligeramente la contribución al espectro de los electrones con mayor energía cinética; por último, al ser el momento dipolar atómico singular en el punto de ensilladura de la integral en el caso del potencial coulombiano, hay que añadir alguna corrección adicional a las integrales que hace que la frecuencia de corte también baje aproximándose al valor clásico.

Vemos cómo este segundo modelo está mucho más trabajado y ofrece más consistencia que el del *hombre ingenuo*. Sin embargo aún presenta una serie de problemas debidos a las suposiciones iniciales.

### 1.4.3 Resolución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

Sin duda, el camino más directo para estudiar la interacción de un átomo hidrogenoide con un pulso láser intenso es resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Esta opción no puede considerarse un modelo más como los dos anteriores desde el momento en que suponemos que la evolución de un sistema atómico en el régimen no relativista viene perfectamente definida por la ecuación de Schrödinger y por lo tanto sus resultados son en este sentido exactos. El único problema que presenta, aparte de los puramente numéricos puesto que analíticamente no ha sido posible resolverla hasta el momento, es que es difícil desbrozar los resultados para extraer información acerca de los mecanismos físicos que los generan, ya que están incluidos todos los acoplamientos posibles entre el campo externo y la estructura atómica. De todos modos, para contrastar la validez de cualquier modelo más simple resulta indispensable comparar sus resultados con la *realidad* dada por la ecuación de Schrödinger -en la realidad experimental no es fácil someter a un átomo de hidrógeno aislado a un campo intenso y observar las consecuencias prescindiendo de la interacción con el resto del universo-.

La ecuación de Schrödinger para el hidrógeno en aproximación dipolar y en el gauge de la posición es

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r} - E(t)x\right]\psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.81)$$

donde hemos elegido un campo polarizado linealmente en la dirección  $x$ . Las primeras soluciones numéricas de esta ecuación datan de finales de la pasada década [52, 53, 54, 55]. Hay varios métodos para resolverla. El más usado consiste en des-

componer la función de onda en sus partes angular y radial, reduciendo el problema a un conjunto de ecuaciones en derivadas parciales del tiempo y la coordenada radial para cada componente angular. En principio este conjunto es infinito, pero se observa que basta considerar un número reducido de momentos angulares para obtener resultados satisfactorios. No existe una regla fija para determinar el momento angular máximo sino que más bien se trata de probar y ver que casi toda la población está incluida en los estados que consideramos. En nuestro caso se ha tomado  $l_{max} = 70$ . La forma de resolver las ecuaciones para cada función angular parcial tampoco es única, habiendo varios algoritmos posibles. No vamos a entrar en detalles puesto que únicamente resolveremos esta ecuación para contrastar sus resultados con los de nuestros modelos y es un tema ampliamente explicado en multitud de publicaciones (véanse por ejemplo [4, 7]). Nosotros seguiremos el esquema desarrollado en nuestro grupo y explicado en [56].

Por tanto, la resolución de la ecuación de Schrödinger tridimensional para el hidrógeno es relativamente sencilla hoy día, pero aún así requiere un tiempo de cálculo no despreciable, más aún si el campo es muy intenso y necesitamos una red espacial muy grande para seguir la evolución de toda la función de onda. Por ello se han utilizado hasta la fecha modelos unidimensionales que reproducen con mejor o peor fortuna los resultados de la ecuación tridimensional. Como en cualquier cálculo unidimensional, para que tenga sentido es forzoso que el campo esté linealmente polarizado y considerar que toda la dinámica importante está en la dirección de polarización. Eso será cierto para campos bastante intensos. La ecuación unidimensional tomará la forma

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - E(t)x\right]\psi(x,t). \quad (1.82)$$

El mayor problema reside en encontrar un potencial atómico que sustituya al coulombiano. La elección más obvia es  $V(x) = -1/|x|$  pero como todo lo que parece fácil a primera vista, en la práctica presenta problemas debido a la

singularidad en el origen que no es posible evitar como en el caso del potencial coulombiano tridimensional. Esta singularidad provoca una degeneración en los niveles de energía y una gran inestabilidad [57]. Por eso se ha venido usando un potencial no singular llamado potencial de Coulomb de núcleo blando o de Rochester [58, 59, 60, 61] de la forma  $V(x) = -Z/\sqrt{a_0^2 + x^2}$ . La mayor ventaja de este potencial es que se comporta asintóticamente como el potencial coulombiano y es regular en el origen. Por ello reproduce bastante bien el proceso de ionización y tiene una serie de estados de Rydberg parecidos a los del hidrógeno. Además la energía y la paridad tienen los mismos autoestados, lo cual es una ventaja para el estudio de las transiciones dipolares eléctricas. El aspecto más negativo es que los autovalores de energía de los estados ligados no son iguales a los del hidrógeno, si bien ajustando los parámetros  $Z$  y  $a_0$  podemos regular la profundidad y anchura del potencial y elegir la posición del estado fundamental. Concretamente para  $Z = 1$  u.a. y  $a_0 = 1.412$  u.a. recuperamos un potencial de ionización de 0.5 u.a.

La resolución numérica de la ecuación de Schrödinger unidimensional está bien documentada y no vamos a exponerla una vez más aquí. Los detalles pueden encontrarse en las referencias anteriores y en la tesis doctoral de Q. Su [62].

## 1.5 Generación de armónicos por electrones libres

Volvamos por un momento al mundo clásico, y con él a las unidades gaussianas. Como ya hemos dicho, una vez ionizado un electrón no es mala aproximación el tratarlo como una partícula clásica sujeta a las leyes de movimiento de Newton, especialmente cuando el campo es muy intenso y el efecto del núcleo apenas tiene importancia. Recuperemos entonces el viejo problema del movimiento de una partícula cargada evolucionando libremente en el seno de un campo electromagnético para ver cómo es su espectro de emisión. Este problema ha sido abordado en infinidad

de ocasiones, quizá la más famosa de las cuales sea el artículo clásico de Sarachik y Schappert en 1970 [63]. Aquí vamos a hacer un tratamiento simplificado [64] puesto que sólo nos interesa el caso de una onda plana linealmente polarizada.

El movimiento de un electrón sometido a un campo electromagnético se rige por la ecuación de Newton-Lorentz

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -e\left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B}\right), \quad (1.83)$$

de la que se deduce, sin más que multiplicar escalarmente por el momento, la de evolución de la energía cinética

$$mc^2 \frac{d\gamma}{dt} = -e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}, \quad (1.84)$$

donde  $\gamma = (1 + p^2/m^2c^2)^{1/2}$  y  $\mathbf{p} = \gamma m\mathbf{v}$ . Supongamos que el potencial vector es una onda plana monocromática polarizada linealmente a lo largo del eje  $y$ ,  $\mathbf{A} = A_0 \cos \eta \hat{y}$ , con  $\eta = \omega_0 t - k_0 x$  la fase. Estamos despreciando aquí el efecto del campo de radiación del electrón sobre su dinámica, lo cual es muy razonable siempre que la longitud de onda de la radiación sea mucho mayor que el radio del electrón [10]. Un estudio reciente sobre el efecto del campo de radiación en el espectro emitido por una partícula relativista puede verse en [65]. Los campos eléctrico y magnético son entonces  $\mathbf{E} = A_0 k_0 \sin \eta \hat{y}$ ,  $\mathbf{B} = A_0 k_0 \sin \eta \hat{z}$ . A partir de las ecuaciones de evolución podemos encontrar dos leyes de conservación

$$mc\gamma - p_x = \alpha, \quad (1.85)$$

$$p_y - e/cA_y = p_{y_0}, \quad (1.86)$$

siendo  $\alpha$  y  $p_{y_0}$  constantes que vendrán impuestas por las condiciones iniciales. Es útil darse cuenta de que sustituyendo  $\gamma$  por su valor, (1.85) puede escribirse como

$$p_x = (m^2c^2 - \alpha^2 + p_y^2)/2\alpha. \quad (1.87)$$

Hay dos sistemas de referencia interesantes en este problema. El primero es el del laboratorio (L), en el que la partícula estará inicialmente en reposo. Las

constantes en este sistema toman valores  $p_{y_0}^{(L)} = 0$ ,  $\alpha^{(L)} = mc$ . El otro sistema de referencia interesante es aquel en el que la partícula está en reposo en promedio a lo largo de un ciclo (R). En este sistema las constantes de integración toman valores  $p_{y_0}^{(R)} = 0$ ,  $\alpha^{(R)} = mc(1 + a_0^2/2)^{1/2} \equiv mc\gamma_0$ , lo que se comprueba fácilmente a partir de (1.86) y (1.87).  $a_0 = eA_0/mc^2$  es el parámetro adimensional proporcional al campo que rige el movimiento de la partícula. Sin más que resolver las ecuaciones de conservación llegamos a las siguientes expresiones para las componentes del momento en el sistema R

$$p_x^{(R)} = \frac{mca_0^2}{4\gamma_0} \cos 2\eta, \quad (1.88)$$

$$p_y^{(R)} = mca_0 \cos \eta. \quad (1.89)$$

Para hallar las órbitas del electrón basta darse cuenta de que  $\mathbf{p} = k_0\alpha/c \, d\mathbf{r}/d\eta$ , lo cual resulta evidente a partir de (1.85) y de que  $d\eta/dt = \omega_0(1 - v_x/c)$ . Integrando (1.88) y (1.89) obtenemos

$$(kx)^{(R)} = \frac{a_0^2}{8\gamma_0} \sin 2\eta, \quad (1.90)$$

$$(ky)^{(R)} = \frac{a_0}{\gamma_0} \sin \eta. \quad (1.91)$$

y en el sistema del laboratorio tendremos

$$p_x^{(L)} = \frac{mca_0^2}{2} \cos^2 \eta, \quad (1.92)$$

$$p_y^{(L)} = mca_0 \cos \eta, \quad (1.93)$$

$$(kx)^{(L)} = \frac{a_0^2}{4} \left( \eta + \frac{\sin 2\eta}{2} \right), \quad (1.94)$$

$$(ky)^{(L)} = a_0 \sin \eta. \quad (1.95)$$

Se comprueba entonces que el sistema R se mueve con respecto al del laboratorio con una velocidad de deriva  $v_D = ca_0^2(4 + a_0^2)^{-1}$ . Sin más que utilizar el hecho de que la fase es invariante Lorentz se observa que las frecuencias en ambos sistemas



están relacionadas por la conocida expresión del efecto Doppler  $\omega_L = \gamma_0 \omega_R$ , donde se ha utilizado la expresión para la velocidad de deriva.

Naturalmente estas soluciones para las órbitas son implícitas puesto que no se puede despejar explícitamente la trayectoria  $\mathbf{r}(t)$  al estar incluida la coordenada  $x$  en la fase  $\eta$ . Sin embargo, podemos darnos cuenta de que el movimiento en el sistema de referencia R es periódico tanto en la dirección del campo como en la de propagación, en este último caso con frecuencia doble. Eliminando  $\eta$  en las ecuaciones paramétricas (1.90) y (1.91) obtenemos la órbita

$$16(kx^{(R)})^2 = (ky^{(R)})^2((a_0/\gamma_0)^2 - (ky^{(R)})^2), \quad (1.96)$$

que nos da la conocida figura de ocho. En el sistema de referencia del laboratorio la trayectoria no es periódica debido a la velocidad de deriva no nula. En la figura 1.10 podemos ver la órbita del electrón en el sistema de referencia en reposo (a) y del laboratorio (b) para tres valores distintos de  $a_0$ . Se observa cómo el ocho va ensanchándose progresivamente y la trayectoria en el sistema de laboratorio va haciéndose más picuda.

El cálculo de la radiación emitida por el electrón es más sencillo en el sistema de referencia R puesto que ahí la órbita es periódica y sabemos que la radiación constará sólo de componentes armónicas, pares e impares dependiendo de la dirección de observación puesto que la frecuencia de oscilación es doble en una dirección que en otra. Para hallar la dependencia espectral se utiliza la expresión (1.41). Una vez que conocemos el espectro de radiación en el sistema de referencia R podemos hallar por transformación de Lorentz la radiación en el sistema de referencia del observador. Los cálculos son bastante complejos y remitimos al lector al trabajo original [63], pero recordaremos algunas conclusiones generales. En primer lugar, en el sistema del laboratorio el espectro no consta de armónicos de la frecuencia inicial sino de otra que depende de la dirección de observación y de la intensidad del campo y que viene dada por  $\omega_0[1 + 1/2a_0^2 \sin^2(\theta/2)]^{-1}$ . Se observa que las fre-

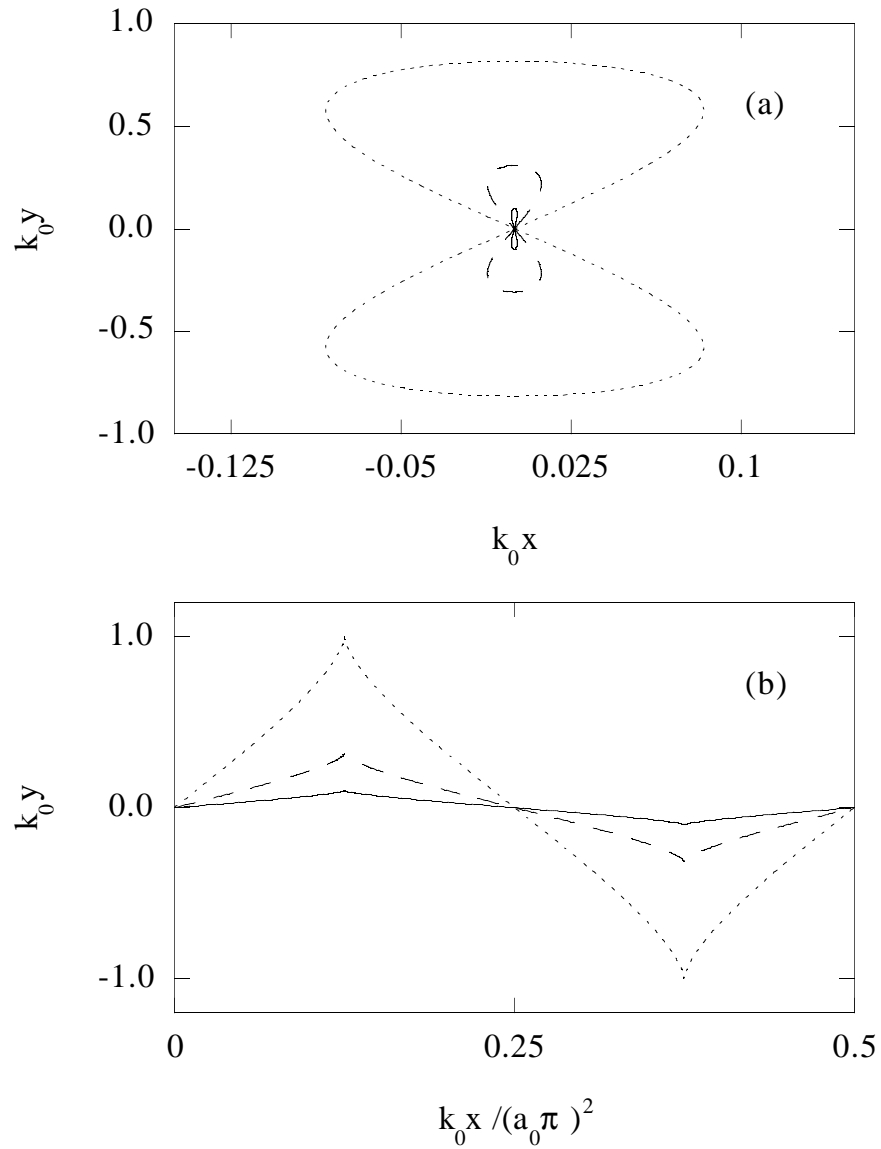


Figura 1.10: Diferencia entre las órbitas de un electrón sometido a una onda plana polarizada linealmente en el sistema de referencia en el que en promedio está en reposo (a) y el del laboratorio (b). La línea continua corresponde a  $a_0^2 = 0.01$ , la de trazos a  $a_0^2 = 0.1$  y la de puntos a  $a_0^2 = 1$ .

cuencias tienden al rojo para campos muy intensos y ángulos grandes. Además la mayor parte de la distribución angular se orienta hacia la dirección de propagación debido al aumento de la velocidad de deriva. En el límite  $a_0 < 1$  la potencia total radiada integrada a todo el espacio puede hallarse en forma de desarrollo en  $a_0^2$ . Se observa que para el armónico  $k$ -ésimo  $P_k \propto a_0^{2k}$ , por lo que va disminuyendo rápidamente con el orden.

Siendo este un mecanismo tan sencillo para generar armónicos ahora que se dispone de láseres ultraintensos, el lector puede preguntarse si se utiliza en la práctica. La respuesta es no. Las evidencias experimentales de generación de armónicos por electrones libres son muy débiles. El motivo es que la radiación por un solo electrón es muy débil y tan pronto como se añaden más electrones, el espectro cambia de forma radical debido a los efectos de propagación que estudiaremos a continuación.

## 1.6 Propagación de armónicos en medios extensos. Desajuste de fase

Hasta este momento hemos hablado de la generación de armónicos en átomos o electrones aislados, dando por supuesto que los resultados son extrapolables a sistemas más complejos. El hecho de que los resultados experimentales concuerden a grandes rasgos con lo predicho por la teoría es sin duda un argumento de peso para quedarnos tranquilos. Sin embargo, los procesos que influyen en la generación y propagación de armónicos en medios extensos son mucho más complicados que lo hasta ahora expuesto y hay una infinidad de factores que pueden tener una influencia respetable. Los más importantes, debido al deterioro que causan a la visibilidad de los armónicos, son los efectos de desajuste de fase.

### 1.6.1 Efectos de desajuste de fase en medios neutros

Este problema ha sido especialmente estudiado en el grupo de Anne L'Huillier [66, 67, 68, 69] en el caso de gases poco densos y campos de intensidades considerables que impiden un tratamiento perturbativo. Aquí vamos a seguir esquemáticamente su tratamiento del problema y a explicar las conclusiones principales. Se trata de hallar el campo resultante de la suma coherente de los distintos dipolos de un medio extenso. Pensemos en un haz linealmente polarizado focalizado sobre un medio isótropo poco denso (experimentalmente puede ser un chorro de gas a baja presión). El campo eléctrico dentro del medio viene descrito por la ecuación de ondas

$$\nabla^2 E - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial^2 P}{\partial t^2}, \quad (1.97)$$

donde  $P$  es la polarización macroscópica. Si el campo incidente es monocromático con frecuencia  $\omega_0$  podemos desarrollar tanto el campo total como la polarización en serie de Fourier

$$E(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \left[ \sum_q E_q(\mathbf{r}) e^{-iq\omega_0 t} + c.c. \right]; \quad P(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \left[ \sum_q P_q(\mathbf{r}) e^{-iq\omega_0 t} + c.c. \right]; \quad (1.98)$$

y la transformada de Fourier de (1.97) nos lleva al siguiente conjunto de ecuaciones

$$\nabla^2 E_q + \left( \frac{q\omega_0}{c} \right)^2 E_q = -4\pi \left( \frac{q\omega_0}{c} \right)^2 P_q. \quad (1.99)$$

La polarización del medio puede dividirse en dos contribuciones,  $P_q = P_q^L + P_q^{NL}$ , donde la polarización lineal  $P_q^L$  constituye la respuesta del medio al campo que se propaga con frecuencia  $q\omega_0$  y podemos suponer que es el producto de la componente  $q$  del campo por la susceptibilidad y la densidad de átomos del medio,  $P_q^L = N\chi(-q\omega_0, q\omega_0)E_q$ . De este modo despreciamos la dependencia de la susceptibilidad con la intensidad del campo y todas las demás correcciones de orden superior. Por su parte, la polarización no lineal engloba todos los procesos resultantes de acoplamientos entre la frecuencia fundamental y los armónicos de orden

inferior que contribuyen a generar una oscilación de orden  $q$ . Aquí vamos a considerar únicamente la contribución del campo principal  $E_1$  a las polarizaciones de orden superior. Esta aproximación deja de ser válida en medios densos en los que el efecto de los acoplamientos entre armónicos superiores no es despreciable [70]. En ese caso el problema de la propagación resulta absolutamente diferente porque hay que tener en cuenta además otros efectos como el campo local, saturación de la absorción, etc. Definimos los números de onda de los distintos modos como

$$k_q = q \frac{\omega_0}{c} n_q = q \frac{\omega_0}{c} \sqrt{1 + 4\pi N \chi(-q\omega_0, q\omega_0)}, \quad (1.100)$$

siendo  $n_q$  los índices de refracción del medio para cada modo. La ecuación (1.99) se reduce entonces a

$$\nabla^2 E_q + k_q^2 E_q = -4\pi \left( \frac{q\omega_0}{c} \right)^2 P_q^{NL}. \quad (1.101)$$

En el caso del armónico fundamental el término de la derecha es por definición nulo. (1.101) puede escribirse de forma equivalente como una ecuación integral. En este caso el propagador es  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = e^{ik_q R}/R$  [32], siendo  $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  y la ecuación se reduce a

$$E_q(\mathbf{r}) = \left( \frac{q\omega_0}{c} \right)^2 \int \frac{e^{ik_q R}}{R} P_q^{NL}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (1.102)$$

Para simplificar el problema podemos utilizar la aproximación paraxial, suponiendo que tenemos un haz que se propaga a lo largo del eje  $x$  y despreciando la posibilidad de reflexión en el medio. Como nos interesa la radiación en campo lejano tendremos que  $R \simeq x - x' + R_{\perp}^2/2(x - x')$ , con  $R_{\perp}^2 = (y - y')^2 + (z - z')^2$ . Llegamos entonces a

$$e_q(\mathbf{r}) = \left( \frac{q\omega_0}{c} \right)^2 \int \frac{e^{-i\Delta k_q x}}{x - x'} \exp\left( \frac{ik_q R_{\perp}^2}{2(x - x')} \right) p_q^{NL}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (1.103)$$

siendo  $e_q(\mathbf{r}) = E_q e^{-ik_q x}$  y  $p_q^{NL}(\mathbf{r}) = P_q^{NL} e^{-iqk_1 x}$  las envolventes lentamente variables en el espacio del campo y la polarización y  $\Delta k_q = k_q - qk_1$  el desajuste de

fase entre la polarización y el campo armónico. Hasta ahora hemos supuesto de forma implícita que el medio es homogéneo. Esto no es así en general y en particular en el caso de un chorro de gas, que tiene una forma más o menos cilíndrica. Para resolver este problema puede sustituirse la fase  $kx$  por la integral de camino óptico  $\int_{-\infty}^x k(x')dx'$ . En la ecuación anterior no hay más que sustituir  $\Delta k_q x$  por  $\langle \Delta k_q x \rangle = \int_{-\infty}^x \Delta k_q(x')dx'$ . El número de fotones emitidos en cada modo por unidad de tiempo, suponiendo una simetría de revolución en torno al eje de propagación, vendrá dado por

$$\Upsilon_q = \frac{c}{4\hbar q \omega_0} \int r' |e_q(r')|^2 dr'. \quad (1.104)$$

El estudio anterior puede extenderse a pulsos largos (en comparación con el periodo óptico), considerando entonces las envolventes también lentamente variables en el tiempo  $e_q(\mathbf{r}', t')$ . En este caso el número total de fotones será  $N_q = \int \Upsilon_q(t') dt'$ , donde la integral se extenderá sobre la duración del pulso.

Para resolver la ecuación (1.103) hace falta conocer la respuesta no lineal del medio, que vendrá dada por el momento dipolar multiplicado por la densidad de átomos,  $p_q^{NL}(x, r) = N(x)d_q(x, r)$ . En general esto no puede hacerse de forma analítica, pero sí para campos muy débiles, cuando es válida la aproximación perturbativa. En este caso podemos escribir la respuesta del medio como  $P_q = N\chi^{(q)}e_1^q/2^{q-1}$ . Si consideramos un campo incidente con perfil gaussiano, como es lo habitual en los experimentos, tendremos que

$$e_1 = \frac{be_0}{b + 2ix} \exp\left(-\frac{k_1 r^2}{b + 2ix}\right), \quad (1.105)$$

siendo  $b$  el parámetro confocal, relacionado con el tamaño del foco mediante la expresión  $b = w_0^2/k_1$ ;  $e_0$  es la amplitud máxima del campo. El cálculo del número de fotones emitidos ofrece entonces como resultado

$$N_q = \frac{\pi^2 b^3}{4\hbar} \tau_q N_0^2 |\chi^{(q)}(e_0/2)^q|^2 |F_q|^2. \quad (1.106)$$

En la expresión anterior  $N_0$  es el máximo de la distribución de densidad atómica en el medio, dada por  $N(x) = N_0\rho(x)$ ,  $\tau_q$  es la integral de la potencia  $q$ -ésima de la distribución temporal de intensidad del láser (depende por tanto de la envolvente temporal del pulso) y  $F_q$  es el llamado factor de ajuste de fase, definido como

$$F_q = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i[(\Delta k_q x) + \phi^{(foc)}]} (1 + 4x^2/b^2)^{1-q/2} 2\rho(x) dx/b. \quad (1.107)$$

$\phi^{(foc)} = (q-1) \arctan(2x/b)$  es el salto de fase de Guoy para un haz gaussiano [71], que consiste en el cambio de fase de  $\pi$  que sufre el haz al atravesar el foco. Cerca del foco el cambio de fase puede aproximarse a  $\phi^{(foc)} \simeq \Delta k_q^{(foc)} x = 2(q-1)/b x$ . En el caso de un medio de perfil rectangular y anchura  $L$  y un haz colimado ( $b \gg L$ ) el factor de ajuste de fase se reduce a

$$F_q = \frac{2L \sin([\Delta k_q + \Delta k_q^{(foc)}]L/2)}{b [\Delta k_q + \Delta k_q^{(foc)}]L/2}. \quad (1.108)$$

Vemos que el desajuste de fase aumenta con el orden armónico y con la disminución del tamaño del haz, provocando que la visibilidad de los armónicos, especialmente los altos, quede muy reducida. Para clarificar el análisis es conveniente tener en cuenta dos longitudes características del medio. La primera es la longitud de amplificación  $L_{amp}$ , dada por el tamaño de la envolvente de  $P_q$  (la zona donde se concentra la amplitud de  $P_q$ ) y que no tiene por qué ser toda la anchura del medio  $L$ ; la segunda es la longitud de coherencia  $L_{coh}$ , que se define como la longitud a lo largo de la cual hay interferencia constructiva entre los armónicos y el campo fundamental. Convencionalmente se define como  $L_{coh} = \pi/\Delta k$ . Dado que  $\Delta k$  tiene dos contribuciones, las debidas a la dispersión cromática y a la fase de enfoque, también habrá dos longitudes de coherencia,  $L_{coh}^{disp} = \pi/\Delta k$  y  $L_{coh}^{foc} \simeq \pi b/2(q-1)$ . La longitud de coherencia total será la media armónica de ambas. Para una mejor propagación lo ideal sería que se cancelaran los efectos de dispersión y de enfoque, lo que nos llevaría a una longitud de coherencia infinita. En realidad basta que la longitud de coherencia y la de amplificación sean iguales puesto que más allá de

$L_{amp}$  no van a generarse armónicos. Sin embargo, cuando  $L_{coh} < L_{amp}$  la señal a la salida del medio es de tipo oscilatorio. Para que se cancelen las dos contribuciones,  $\Delta k^{disp}$  debe ser negativo puesto que la otra contribución es siempre positiva y crece con el orden armónico. En el caso de gases muy poco densos el valor de  $\Delta k^{disp}$  dependerá del rango de frecuencias en que nos encontremos: si la frecuencia es menor que la de la primera resonancia, el índice de refracción aumentará ligeramente con la frecuencia (dispersión normal) y en general  $\Delta k^{disp}$  será positivo y muy pequeño, con lo que el desajuste de fase dependerá casi por completo de la geometría del enfoque. Si la frecuencia es más alta y estamos en zona de resonancia, la dispersión tomará valores muy altos, positivos en zona de dispersión normal y negativos en zona de dispersión anómala. En este último caso es posible que la dispersión cancele los efectos del enfoque para determinados armónicos. Para frecuencias por encima del potencial de ionización, la aparición de electrones ionizados tiene un papel decisivo, como veremos a continuación.

Pese a todo, los armónicos de orden alto y la estructura de meseta son bien visibles en los experimentos. Es evidente por lo tanto que la aproximación perturbativa para la propagación en campos débiles no funciona. Efectivamente, calculando el desajuste de fase numéricamente a partir de la polarización creada por los momentos dipolares obtenidos en simulaciones de átomos aislados se comprueba que el desajuste de fase es menor y depende poco del orden armónico [68]. Esto deja de ser cierto cuando la densidad de electrones libres es alta.

### 1.6.2 Efectos de desajuste de fase en medios ionizados

Cuando el campo o la frecuencia son lo suficientemente altos como para que la ionización sea considerable, no podemos despreciar el efecto de los electrones libres en la propagación de los armónicos. Podemos extender la ecuación (1.103) teniendo en cuenta la absorción debida a electrones libres permitiendo que  $\Delta k_q$  tenga una



parte imaginaria. Entonces sustituiríamos  $\Delta k_q x$  por  $\langle \Delta k_q x \rangle = \int_{-\infty}^x (\Delta k_q(x') - i\kappa_q(x')) dx'$ . Un tratamiento más sencillo puede hacerse cuando la densidad de electrones no es demasiado alta. En este caso podemos despreciar las colisiones entre electrones y utilizar la conocida expresión para el índice de refracción [72]

$$n_{el}(\omega) = \sqrt{1 - \left(\frac{\omega_p}{\omega}\right)^2}, \quad (1.109)$$

siendo  $\omega_p = (4\pi N q^2/m)^{1/2}$  la frecuencia de plasma, que para los electrones se reduce a  $\omega_p = (4\pi N_e)^{1/2}$  en unidades atómicas. En el caso de los gases a baja presión la frecuencia de plasma va a ser siempre mucho menor que las frecuencias visibles (para un láser de longitud de onda  $1 \mu\text{m}$  hace falta una densidad de electrones mayor que  $10^{21} \text{ cm}^{-3}$  para que la frecuencia de plasma iguale a la del campo, y en los experimentos con gases la densidad es varios órdenes de magnitud más baja). Podemos entonces aproximar  $n_{el} \simeq 1 - \omega_p^2/2\omega^2$ , lo cual introduce un desajuste de fase adicional dado por

$$\Delta k_q^{el} = \frac{\omega_p^2(q^2 - 1)}{2qc\omega_0}. \quad (1.110)$$

Esta contribución es siempre positiva y para armónicos altos depende linealmente de  $q$ . Para tener una idea de la magnitud del desajuste de fase causado por los electrones libres, podemos compararlo con la contribución por desenfoque. Se observa que para un haz de longitud de onda  $1 \mu\text{m}$  y con parámetro confocal  $b = 10 \text{ mm}$ , la densidad a partir de la cual el efecto de los electrones libres es más importante que el de enfoque es  $N_e \sim 7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , mil veces menor que la encontrada típicamente en experimentos con gases nobles a presiones de 15 Torr. Así pues, el efecto de los electrones libres es el dominante en casos reales y lleva a desajustes de fase importantes.

Otro efecto directamente relacionado con el anterior es el desenfoque del haz. Al ser la intensidad del campo mayor en la zona central, habrá más electrones ionizados en ella, por lo que su índice de refracción será menor que el de la periferia.

Esto hace que el campo tienda a propagarse por la zona externa y por ello son visibles patrones de anillos en los campos armónicos experimentales. Cuando el campo sea muy intenso, sin embargo, ocurrirá todo lo contrario debido a que la fuerza ponderomotriz se hace tan grande que los electrones se apartan al paso del haz, generándose filamentación.

Recordemos ahora los armónicos generados por electrones libres. En ese caso los efectos de desajuste de fase son especialmente importantes puesto que la radiación emitida es en general débil. Estos efectos pueden estimarse sin más que hallar el campo de radiación de un conjunto de electrones sometidos a un campo intenso. Se observa en estos cálculos que bastan densidades de electrones del orden de  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  para que sólo haya interferencia constructiva de cuatro o cinco armónicos, cuya potencia depende del cuadrado de la densidad de electrones, mientras que los de orden superior son prácticamente invisibles debido al desajuste de fase [73]. Por fortuna para nosotros, cuando la densidad crece los efectos colectivos son importantes y aparecen otros mecanismos capaces de generar armónicos mucho más intensos.

## 1.7 Generación de armónicos en plasmas

Un plasma no es más que un gas de partículas ionizadas. Este gas estará compuesto por electrones e iones que, al tener en general una relación carga-masa muy distinta, se comportarán de forma diferente al estar sometidos a los campos electromagnéticos externos e internos. Lo habitual en el estudio de los plasmas es tratar a electrones e iones como dos fluidos diferentes y descomponer la dinámica del sistema en dos partes cuyas escalas espaciales y temporales son bien distintas [74]. Cuando estudiamos la interacción de los plasmas con pulsos ultracortos, no es mala aproximación suponer que los iones apenas se mueven durante el tiempo de interacción y considerarlos como cargas fijas. El plasma puede ser entendido

entonces como un gas de electrones sujeto a un potencial iónico estático y al campo externo. Más adelante profundizaremos en estos aspectos cuando expliquemos la simulación numérica de plasmas.

Ya hemos visto que la propagación de un campo electromagnético en un gas de electrones depende de la llamada frecuencia de plasma, o lo que es lo mismo de su densidad. Se define la densidad crítica como aquella para la cual la frecuencia de plasma se iguala a la del campo,  $N_c = m\omega_0^2/4\pi q^2$ . Observando la expresión (1.109) vemos que si la densidad es menor que la crítica el campo puede propagarse dentro del material. Hablamos entonces de plasmas subcríticos o subdensos. Por el contrario, cuando la densidad supera el valor crítico el campo es totalmente absorbido en un espacio muy corto y el medio se muestra opaco a la radiación de esa frecuencia. Este es el caso de los plasmas supercríticos o sobredensos.

El estudio de la interacción entre plasmas y campos electromagnéticos intensos tiene gran importancia en los últimos años por su interés en disciplinas tan distintas como la astrofísica, la física de partículas aceleradas o la fusión por confinamiento inercial [75].

Podemos pensar que los armónicos generados en plasmas son similares a los creados por electrones libres (sección 1.5). Esto no es así debido no sólo a los efectos de propagación sino a que la dinámica de los electrones en un plasma depende mucho de las fuerzas colectivas. El modelo más simple es considerar que el efecto sobre un electrón del resto de las cargas es equivalente a una fuerza recuperadora, siendo entonces la ecuación de evolución

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -e\left(\mathbf{E} + \frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B}\right) - \omega_{p0}^2\mathbf{r}, \quad (1.111)$$

Esa nueva fuerza hace que el movimiento, y por tanto la radiación emitida, cambien totalmente [76]. Lo más evidente es que debido a la fuerza recuperadora necesariamente se anula la velocidad de deriva.

En el caso de un plasma subcrítico, el método más conveniente para estudiar los

armónicos es utilizar una descripción hidrodinámica del medio, tratándolo como un fluido. Tal estudio queda fuera de los objetivos de este trabajo, estando detallado en varias referencias [64, 77]. Se observa que los armónicos se generan por dos mecanismos distintos: el efecto del movimiento no lineal de los electrones relativistas analizado en la sección 1.5 y las oscilaciones colectivas de la densidad de electrones. Desgraciadamente estos dos efectos se cancelan en el orden más bajo y por ello los armónicos generados son poco intensos. El resultado final, si tenemos en cuenta efectos de desenfoque y dispersión cromática de los armónicos es que la potencia radiada para armónicos bajos tiene una dependencia del tipo

$$P_{2M+1} \propto \left(\frac{\omega_{p0}}{\omega_0}\right)^{4M} \frac{a_0^{4M}}{\gamma_0^{6M}} P_0, \quad (1.112)$$

siendo  $P_0$  la potencia del campo incidente y  $a_0$ ,  $\gamma_0$  los parámetros definidos en la sección 1.5. La potencia disminuye rápidamente con el orden puesto que el plasma es subcrítico. El máximo con respecto a la intensidad del láser lo tiene para  $a_0 = 2$  y a partir de ahí comienza a decrecer, por lo que ni siquiera aumentando indiscriminadamente la intensidad del láser conseguimos más radiación armónica. A esto hay que añadir todos los problemas de desajuste de fase debidos a la propagación en medios extensos que ya hemos explicado. No resulta entonces extraño que experimentalmente tampoco haya evidencias precisas de generación de armónicos altos en plasmas subdensos. La solución está en los plasmas sobredensos.

Un plasma sobredenso se caracteriza porque la frecuencia de plasma es mayor que la del campo incidente y por consiguiente el campo no puede propagarse libremente en el medio, siendo reflejado casi totalmente. A diferencia de lo que ocurre en los plasmas subdensos, en el caso supercrítico hay abundantes evidencias experimentales de generación de armónicos altos. Ya en los años 70 se observaron armónicos hasta el orden undécimo en un experimento con un láser de  $\text{CO}_2$  con pulsos de duración 2 ns [78]. La primera revolución la produjo un experimento llevado a cabo en 1980 por Carman y otros en el que irradiando láminas de plástico y

metálicas con un láser de  $\text{CO}_2$  de intensidad superior a  $10^{15} \text{ W/cm}^2$  lograban crear un plasma que radiaba armónicos detectables hasta el orden cuadragésimosexto que no decaían rápidamente con el orden sino que presentaban intensidades parecidas [79, 80]. Los armónicos observados eran tanto pares como impares e incluso eran visibles rayas espectrales de frecuencia semiarmónica aunque mucho menos intensas. Estos experimentos atrajeron inmediatamente el interés de muchos investigadores por su potencialidad como mecanismo generador de radiación coherente de alta frecuencia con alta eficiencia. Los primeros modelos teóricos explicaron plausiblemente los resultados experimentales, obteniendo como conclusión que podía obtenerse un espectro de armónicos más o menos con forma de meseta hasta una frecuencia de corte dada por

$$\omega_{co} = \sqrt{\frac{N}{N_c}} \omega_0. \quad (1.113)$$

A la vista de la expresión anterior el límite en frecuencia lo marca únicamente la densidad máxima de electrones que podemos obtener y la longitud de onda del láser, a través de  $N_c$ . Sin embargo, un reciente experimento realizado por Norreys y otros [81] pulverizó los resultados anteriores y de paso la ley de la frecuencia de corte. Incidiendo en una lámina de plástico con pulsos de 2.5 ps de duración e intensidad  $10^{19} \text{ W/cm}^2$  procedentes de un láser de neodimio, se observaron armónicos por encima del orden 70 con eficiencias superiores a  $10^{-6}$ , es decir, se obtenía radiación del orden de megavatios en longitudes de onda de 15 nm. De ser correcta la expresión (1.113), la densidad de electrones en el medio debería superar en 17 veces la densidad típica de la diana en estado sólido, cosa poco creíble. Paralelamente se han ido realizando estudios teóricos cada vez más complejos, en muchos casos con ayuda de simulaciones cinéticas de plasma de tipo "partícula en celda" que han permitido comprender bastante bien los principales mecanismos generadores de armónicos y reproducir los resultados experimentales en algunos casos con gran exactitud [82, 83, 84, 85, 86]. En la figura 1.11 podemos

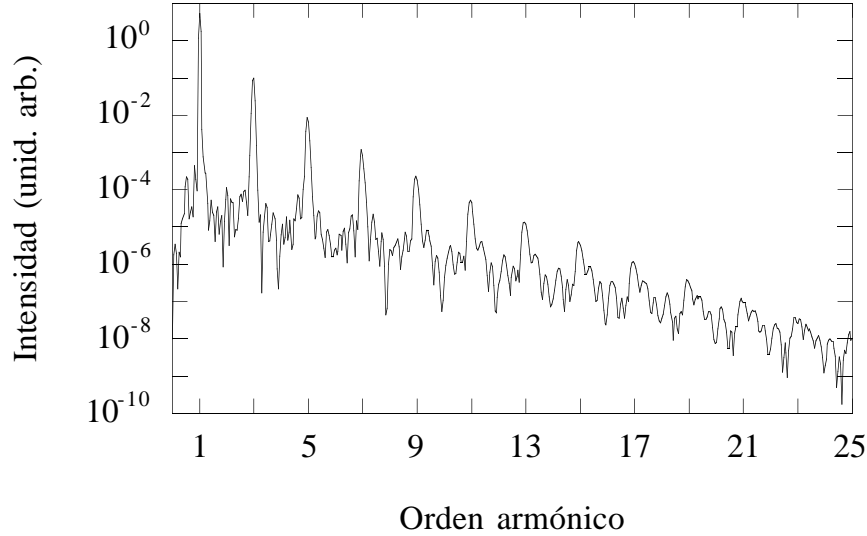


Figura 1.11: Espectro del campo reflejado cuando un pulso de longitud 20 ciclos ópticos y amplitud máxima  $E_0 = 5$  u.a. incide normalmente sobre un plasma homogéneo de densidad cuatro veces la crítica.

ver un espectro típico de la interacción de un pulso láser intenso con un plasma sobredenso.

Los procesos capaces de generar armónicos y en general frecuencias altas en plasmas sobredensos son varios y aquí no vamos a referirnos a todos ellos. La mayoría son más efectivos cuando el láser no incide perpendicular sino oblicuamente a la superficie del objetivo y la dirección de polarización está en el plano de incidencia (polarización  $p$ ). El motivo es que en este caso el acoplamiento del campo con las oscilaciones propias del plasma, que son longitudinales, es mucho más importante. En el caso de incidencia normal este acoplamiento se produce a través del término  $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  de la fuerza de Lorentz, que es de segundo orden salvo en el caso ultrarrelativista. A pesar de esto, nosotros vamos a restringirnos a esta geometría porque nuestro interés está en estudiar los efectos de la ionización, que en principio no deben depender del ángulo de incidencia del haz. Vamos entonces a

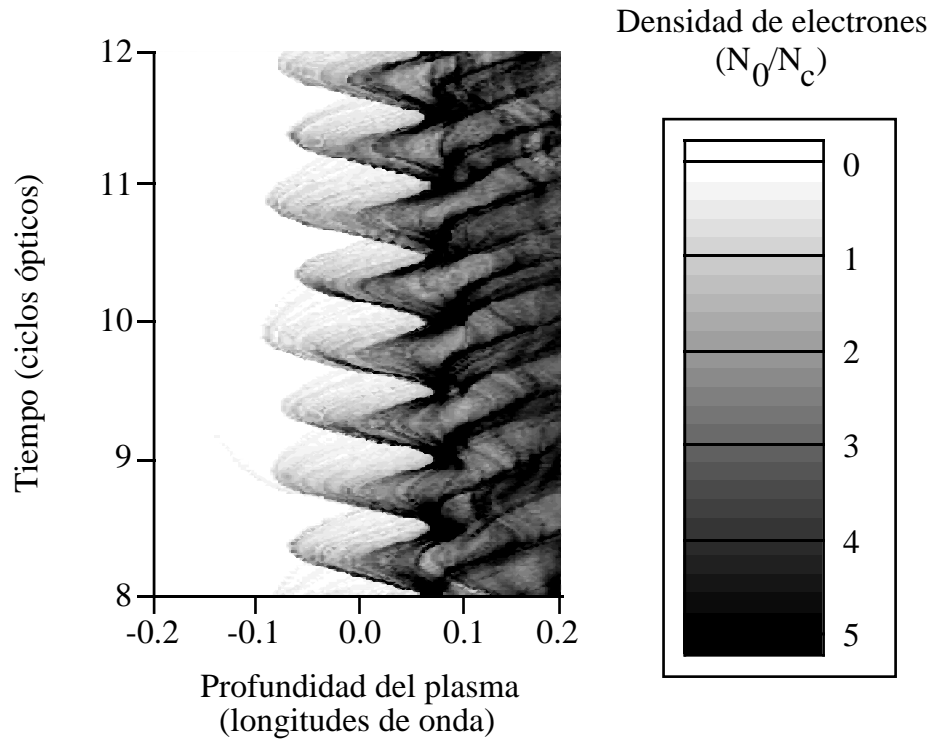


Figura 1.12: Evolución de la densidad de electrones libres en la frontera de un plasma sobredenso sometido a un campo electromagnético intenso.

explicar cómo se generan los armónicos por el mecanismo referido, olvidándonos de otros como la absorción resonante, inestabilidades paramétricas o efectos de inhomogeneidad transversal (véase por ejemplo [64] y las referencias allí incluidas).

Ya hemos dicho que en un plasma denso los electrones además de estar sujetos al campo externo sufren una importante fuerza colectiva, en primera aproximación de tipo armónico con la frecuencia del plasma, que les impide moverse libremente en el seno del medio. Esto va a provocar que el movimiento de deriva en la dirección del propagación del campo sea mucho menor y por tanto que la radiación sea mucho más selectiva tanto en frecuencias como en dirección. Hay que tener en cuenta además que el campo será reflejado en un espacio muy corto, tanto menor cuanto mayor sea la densidad. La interacción se produce entonces en una

lámina muy fina que va a oscilar colectivamente como un espejo con una frecuencia doble que la del campo incidente (recordemos la figura de ocho con frecuencia doble en la dirección longitudinal). Podemos ver un ejemplo de las oscilaciones de los electrones superficiales en la figura 1.12, en la que se aprecian claramente los movimientos colectivos. Dichas oscilaciones de superficie van a generar toda la radiación secundaria que va a reflejarse en su mayoría puesto que en el interior del medio no puede propagarse (salvo que la lámina sea muy fina, como veremos).

Una forma sencilla de explicar cómo se generan los armónicos es el llamado modelo del *espejo oscilante* [85, 86]. Consiste en suponer que la distribución de los electrones libres tiene una superficie de separación con el vacío perfectamente definida que se mueve en torno a la superficie inicial del material definida por la posición de los iones de la frontera, tal y como veíamos en la figura 1.12. La versión más sencilla de este modelo [86] resuelve la ecuación de movimiento para los electrones (1.111). Las ecuaciones para un campo linealmente polarizado en la dirección  $y$  que se propaga a lo largo del eje  $x$ , perpendicular a la superficie frontera, las ecuaciones toman la forma

$$\frac{dp_y}{dt} = -eE_y \left( t - \frac{x}{c} \right) + e \frac{v_x}{c} B_z \left( t - \frac{x}{c} \right), \quad (1.114)$$

$$\frac{dp_x}{dt} = -e \frac{v_y}{c} B_z \left( t - \frac{x}{c} \right) - \omega_p^2 x, \quad (1.115)$$

$$\frac{dx}{dt} = v_x, \quad (1.116)$$

donde se supone una frecuencia de plasma constante dentro del medio. Cuando el plasma es muy sobredenso tiene sentido imponer que la superficie frontera actúa como un espejo ideal en el que el campo eléctrico total se anula, por lo cual se verificará

$$E_R \left( t + \frac{x(t)}{c} \right) + \frac{1 - \beta_x}{1 + \beta_x} E_0 \sin \left[ \omega_0 \left( \frac{t - x(t)}{c} \right) \right] = 0, \quad (1.117)$$

siendo  $E_R$  el campo reflejado y habiendo supuesto un campo incidente de amplitud constante y frecuencia  $\omega_0$ . El factor relativista  $(1 - \beta_x)/(1 + \beta_x)$  aparece al hacer



una transformación de Lorentz al sistema del laboratorio puesto que la continuidad del campo hay que imponerla en el sistema de referencia en el que el espejo está en reposo [87].

Resolviendo las ecuaciones (1.114)-(1.117) se obtiene que el campo reflejado contiene armónicos altos debidos al término  $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  en las ecuaciones de movimiento y al efecto del retardo en la ecuación (1.117), que es fundamental. Para la geometría que hemos elegido, con el campo polarizado linealmente y en incidencia normal, puede comprobarse que, en primera aproximación, en el campo reflejado sólo aparecen armónicos impares. Puede ampliarse el estudio a otras geometrías, obteniendo como resultado que en incidencia oblicua para polarización perpendicular al plano de incidencia (polarización  $s$ ) hay armónicos impares polarizados  $s$  y armónicos pares polarizados  $p$ . Estos últimos son menos intensos y desaparecen en incidencia normal. Si el campo incidente es oblicuo y con polarización  $p$  se obtienen armónicos pares e impares siempre con la misma polarización que el incidente. En el caso de luz incidente polarizada circularmente pueden generarse armónicos débiles en cualquiera de las dos direcciones de polarización en incidencia oblicua pero en incidencia normal no hay armónicos puesto que el módulo del campo incidente es siempre constante [85, 86].

Hemos visto entonces que en un plasma sobredenso con perfil de densidad bien definido las oscilaciones colectivas de su superficie inducidas por un pulso láser intenso (en incidencia normal por el término  $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ ) más otros efectos relativistas como el retardo hacen posible la generación de armónicos altos intensos, siendo hasta ahora una de las fuentes de radiación coherente de alta frecuencia más prometedoras. En esta sección no se ha tenido en cuenta el efecto de la ionización puesto que hemos supuesto que el plasma estaba previamente creado. Veremos más adelante que las cosas cambiarán en el caso de campos no demasiado intensos para los que ionizar totalmente el material necesite varios ciclos ópticos.



## Capítulo 2

# Generación de armónicos en un sistema de dos niveles abierto

En este capítulo vamos a intentar explicar por un lado el efecto que tiene en la generación de armónicos en átomos el hecho de que la tasa de ionización no sea constante sino que dependa del tiempo y por otro cuál es la función de las transiciones entre estados ligados en los armónicos generados en el régimen de ionización por túnel. Para ello vamos a introducir un modelo de átomo en el que sólo tenemos en cuenta dos estados ligados cuya población puede escapar por ionización (de ahí el apelativo de abierto) y volver por recombinación. Este modelo es el más sencillo que puede imaginarse en el que haya transiciones entre estados ligados (una) y transiciones de estados ligados a otros del continuo (dos) y por ello lo hemos elegido. Veremos que a pesar de su simplicidad puede dar bastante juego.

### 2.1 Generación de armónicos en sistemas de dos niveles

Los sistemas de dos niveles se han usado desde hace mucho tiempo como modelo en la interacción de campos electromagnéticos con medios materiales [88]. Aunque es evidente que reducir la dinámica de un medio cuántico a la evolución de sólo dos

de sus niveles es una simplificación sólo justificable para campos de baja intensidad cuya frecuencia esté próxima a una resonancia, este modelo puede darnos bastante información también fuera de su teórico rango de validez.

Recordemos las ecuaciones de evolución de un sistema de dos niveles sometido a un campo externo en aproximación dipolar eléctrica. Partimos de la ecuación de Schrödinger general (de nuevo en unidades atómicas)

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = (H_0 + H_{int})|\psi\rangle. \quad (2.1)$$

El hamiltoniano atómico  $H_0$  incluye el término de energía cinética y el potencial electrostático atómico y el hamiltoniano de interacción en aproximación dipolar será  $H_{int} = -E(t)x$ , donde ya suponemos que el campo externo estará polarizado linealmente en la dirección  $x$ . Suponemos además que la función de onda es una combinación lineal de dos estados propios del hamiltoniano atómico

$$|\psi\rangle = a_0(t)|0\rangle + a_1(t)|1\rangle. \quad (2.2)$$

Estableciendo nuestro nivel de energía en el estado fundamental, el hamiltoniano atómico opera sobre sus dos autoestados de la forma

$$\begin{aligned} H_0|0\rangle &= 0|0\rangle, \\ H_0|1\rangle &= \omega_T|1\rangle, \end{aligned} \quad (2.3)$$

donde  $\omega_T$  es la frecuencia de la transición, es decir, la diferencia entre los niveles de energía de los dos estados. Proyectando (2.1) sobre los dos estados obtenemos las ecuaciones de evolución de nuestro sistema

$$\frac{da_0(t)}{dt} = -iE(t)d_{01}a_1(t), \quad (2.4)$$

$$\frac{da_1(t)}{dt} = -iE(t)d_{01}a_0(t) - i\omega_T a_1(t), \quad (2.5)$$

donde  $d_{01} = \langle 1|x|0\rangle$ , que podemos suponer real y hemos utilizado el hecho de que debido a la simetría del potencial  $\langle 0|x|0\rangle = \langle 1|x|1\rangle = 0$ . El momento dipolar

dependiente del tiempo será  $d(t) = d_{01}[a_0^*(t)a_1(t) + a_0(t)a_1^*(t)]$  y para calcular el espectro se utiliza su derivada segunda. Las poblaciones de los niveles vienen dadas por  $P_i(t) = |a_i(t)|^2$ . Las ecuaciones (2.4) y (2.5) son claramente no lineales y no pueden resolverse analíticamente para un campo sinusoidal. Debido a esta no linealidad el sistema de dos niveles es capaz de generar frecuencias diferentes a la del campo incidente y a la propia de la transición.

A partir de ahora vamos a suponer que nuestro sistema de dos niveles simula los dos primeros estados del hidrógeno acoplados mediante una transición dipolar eléctrica, esto es, el estado fundamental  $1s$  y el excitado  $2p_x$ . La frecuencia de la transición será entonces  $\omega_T = 0.375$  a.u. y el momento dipolar  $d_{01} = 0.745$  a.u. [89]. Además vamos a partir siempre de un estado inicial en el que toda la población está en el estado fundamental. El efecto de un estado inicial distinto del fundamental es que la intensidad de los acoplamientos entre la frecuencia de la transición y la del láser es mayor, lo cual se traduce en unas líneas hiper-Raman (combinaciones de la frecuencia de la transición y la del campo) más intensas en el espectro [90]. Cuando tenemos en cuenta la ionización hay otro efecto adicional que es la aparición de dos espectros de armónicos de diferente intensidad desplazados por la frecuencia de la transición [91, 92]. El campo será siempre de la forma  $E(t) = E_0 S(t) \sin(\omega_0 t)$ , con  $S(t)$  una envolvente que en este caso va a tener forma de trapecio con dos ciclos de rampa y el resto de amplitud constante. No vamos a tratar aquí el efecto de campos no monocromáticos, que ha sido extensamente estudiado en la literatura, especialmente en el caso de pulsos de dos colores. Al lector interesado se le remite por ejemplo a [7]. Para resolver numéricamente las ecuaciones de evolución (2.4) y (2.5) usamos el algoritmo de Runge-Kutta de cuarto orden con un paso suficientemente pequeño [93].

En la figura 2.1 podemos observar la evolución de las poblaciones de los dos estados y el momento dipolar cuando sometemos al sistema de dos niveles a un

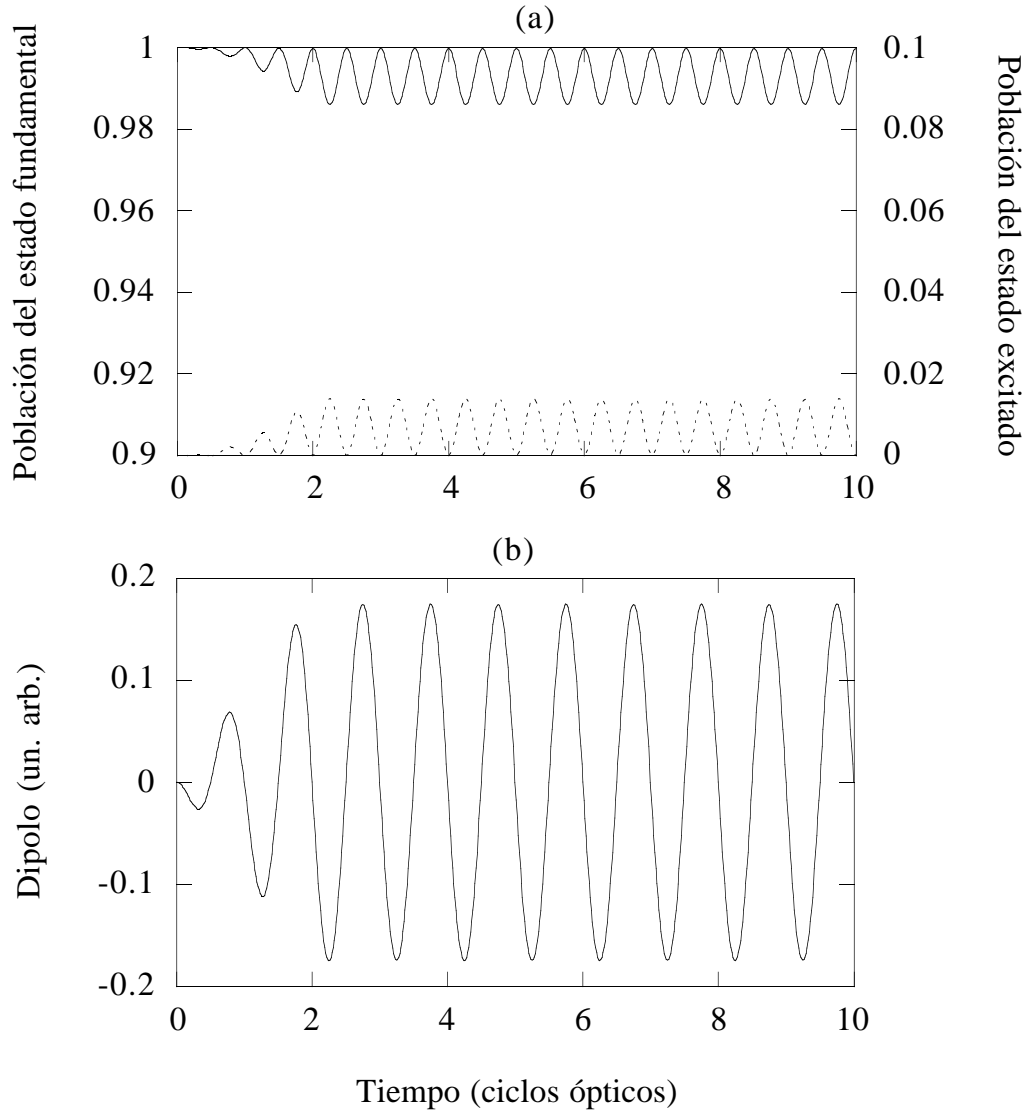


Figura 2.1: Evolución de las poblaciones de los estados fundamental (línea continua) y excitado (línea de puntos) para un pulso de frecuencia  $\omega_0 = 0.04$  u.a., amplitud  $E_0 = 0.06$  u.a. y duración diez ciclos, dos de ellos de rampa lineal (a). En la gráfica (b) está representado el correspondiente momento dipolar.

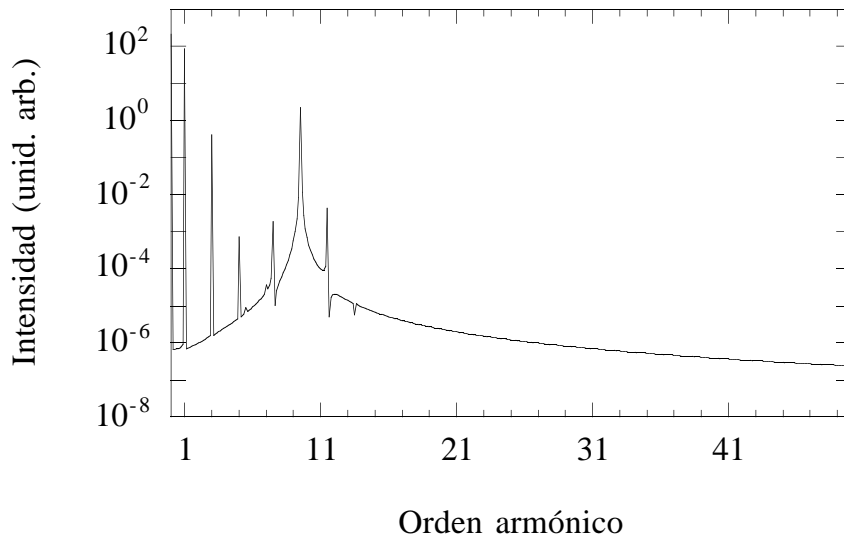


Figura 2.2: Espectro correspondiente a la aceleración dipolar en el mismo caso de la figura 2.1.

pulso de frecuencia  $\omega_0 = 0.04$  u.a. y amplitud  $E_0 = 0.06$  u.a., parámetros que corresponden a un caso claro de ionización por túnel en el átomo de hidrógeno. Podemos observar las pequeñas oscilaciones de las poblaciones, siendo la del estado excitado nunca superior al dos por ciento del total. El momento dipolar también oscila en apariencia armónicamente con la frecuencia del láser.

Si realizamos la transformada de Fourier de la aceleración dipolar (despreciando los dos ciclos de rampa) observamos lo que aparece en la figura 2.2. Vemos que efectivamente la componente fundamental es la más intensa y aparecen picos correspondientes al tercer y quinto armónicos y claramente la frecuencia de la transición, que en este caso es  $\omega_T \simeq 9.4\omega_0$  rodeada de dos satélites en  $\omega_T - \omega_0$  y  $\omega_T + \omega_0$ . Este espectro no es muy estimulante pero es sabido que un sistema de dos niveles puede generar un espectro de armónicos con características muy similares a las de un átomo real, es decir, con una meseta de armónicos de aproximadamente la misma intensidad y una frecuencia de corte a partir de la cual caen abrupta-

mente [36]. En las figuras 2.3 y 2.4 podemos ver qué ocurre cuando elevamos la amplitud del campo hasta  $E_0 = 0.5$  u.a. Para empezar, las poblaciones oscilan con mayor amplitud, llegando a tener el nivel excitado más de la cuarta parte de la población total y se observan claramente oscilaciones más pequeñas de frecuencia mucho más alta. Análogamente el momento dipolar oscila más fuertemente y de forma no armónica. El resultado se deja ver en el espectro, en el que aparecen picos mucho más intensos de armónicos impares hasta el orden trigésimo con una zona de meseta y un decaimiento a partir del vigésimo primero aproximadamente. Además aparecen otras frecuencias combinaciones de la del campo y la de la resonancia.

Puede darse una expresión para la frecuencia de corte de un modo bastante riguroso [89, 94] pero podemos obtener la misma expresión con una sencilla aproximación adiabática [89, 90, 95]. Para frecuencias del campo muy pequeñas (menores que la de la transición y que la de Rabi,  $\Omega_R = d_{01}E_0$ , como es el caso) podemos pensar que las transiciones se producen no entre los estados no perturbados sino entre los estados vestidos instantáneos, cuyas energías se calculan como los autovalores del hamiltoniano

$$H = \begin{pmatrix} 0 & d_{01}E(t) \\ d_{01}E(t) & \omega_T \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

que resultan ser

$$\lambda_{\pm} = \frac{\omega_T}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\omega_T^2 + 4d_{01}^2 E(t)^2}. \quad (2.7)$$

Así pues, la frecuencia efectiva de la transición oscilará entre el mínimo y el máximo de la diferencia de energía entre los estados vestidos,  $\lambda_+ - \lambda_- = \sqrt{\omega_T^2 + 4(E(t)d)^2}$ , que dan los valores de la frecuencia de inicio de la meseta,  $\omega_T$  y la de corte de la misma,  $\omega_{co} = \sqrt{\omega_T^2 + 4\Omega_R^2}$ . Esta fórmula nos da en este caso un valor  $\omega_{co} \simeq 20.8\omega_0$ , que se ajusta muy bien al resultado de la figura 2.4. El hecho de que apareciera este tipo de espectro en un sistema tan sencillo hizo albergar esperanzas de que la estructura de meseta observada en los experimentos estuviera



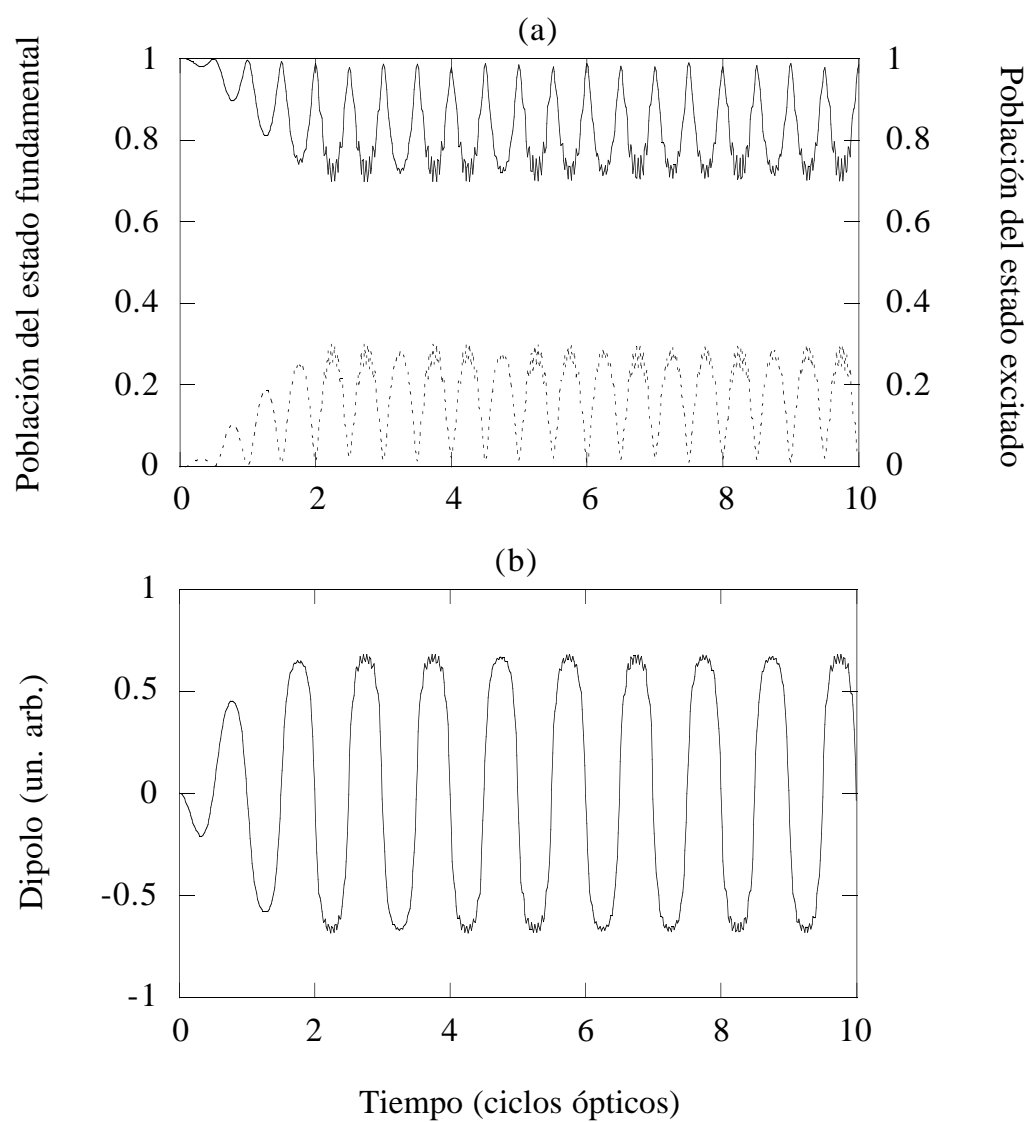


Figura 2.3: Lo mismo que en la figura 2.1 pero con un campo de amplitud  $E_0 = 0.5$  u.a.

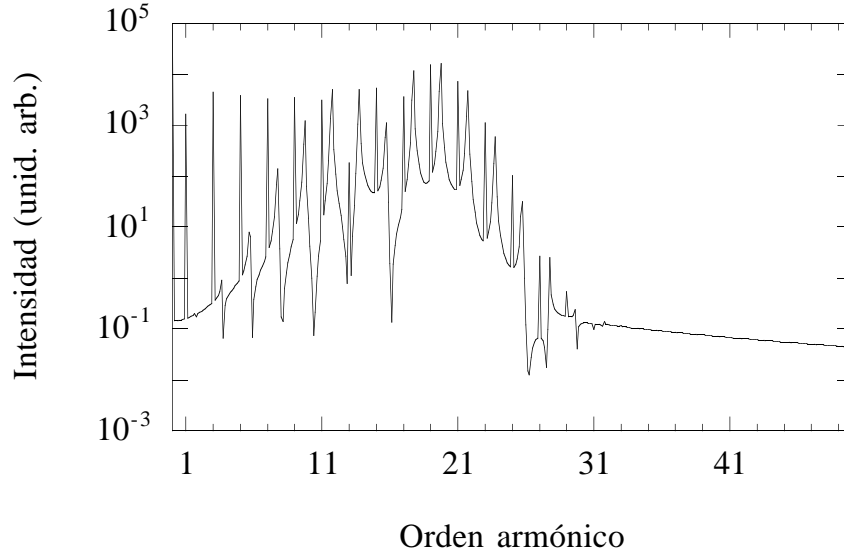


Figura 2.4: Espectro correspondiente a los parámetros de la figura 2.3.

relacionada con las transiciones entre estados ligados. Sin embargo, a cualquiera le resulta evidente que para una amplitud del campo de media unidad atómica no podemos representar el átomo de hidrógeno como un sistema de dos niveles, en particular no podemos olvidarnos del efecto de la ionización puesto que a esas intensidades en un caso real apenas quedaría población ligada al cabo de un par de ciclos. Veamos, pues, qué ocurre cuando introducimos la ionización en nuestro modelo.

## 2.2 Efecto de la ionización dependiente del tiempo en los armónicos generados por transiciones entre estados ligados [95]

El efecto de la ionización en un sistema cerrado como un átomo de dos niveles es la pérdida tanto de población como de coherencia. La forma más sencilla de incluirla en nuestras ecuaciones es mediante una tasa de ionización que describa

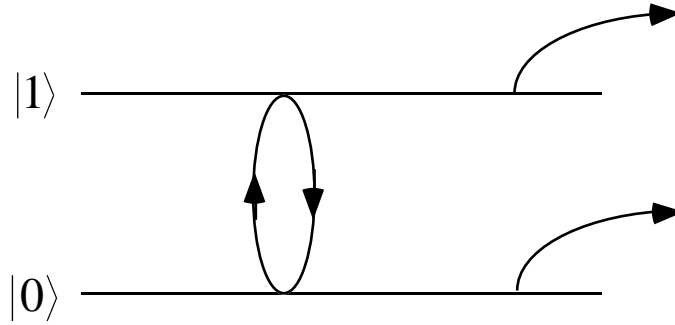


Figura 2.5: Esquema del sistema de dos niveles abierto. Las flechas representan la transferencia de población.

el decaimiento en la amplitud de cada nivel. Tendremos entonces un sistema de dos niveles abierto, tal y como puede verse en la figura 2.5, cuyas ecuaciones de evolución son

$$\frac{da_0(t)}{dt} = -iE(t)d_{01}a_1(t) - \frac{\gamma_0(t)}{2}a_0(t), \quad (2.8)$$

$$\frac{da_1(t)}{dt} = -iE(t)d_{01}a_0(t) - \left[\frac{\gamma_1(t)}{2} + i\omega_T\right]a_1(t). \quad (2.9)$$

Para las tasas de ionización elegiremos las expresiones que nos da la ecuación (1.15) para los estados  $1s$  y  $2p$  del hidrógeno, y que son

$$\gamma_0(t) = 4E_0^{-2}|E(t)| \exp\left(-\frac{2}{3|E(t)|}\right), \quad (2.10)$$

$$\gamma_1(t) = 2^{-7}E_0^{-4}|E(t)| \exp\left(-\frac{1}{12|E(t)|}\right). \quad (2.11)$$

Ambas dependen fuertemente del tiempo a través del campo eléctrico, como podemos ver en la figura 2.6. La ionización tiene dos máximos que corresponden a los extremos del campo y se hace cero cuando éste cambia de signo. Para un campo  $E_0 = 0.06$  u.a. la tasa de ionización del estado excitado es cuatro órdenes de magnitud superior a la del estado fundamental y por ello será la más importante. Si resolvemos las ecuaciones (2.8) y (2.9) para nuestros parámetros habituales ( $E_0 = 0.06$  u.a.,  $\omega_0 = 0.04$  u.a.) obtenemos un espectro muy diferente al del átomo de dos niveles convencional, tal y como apreciamos en la figura 2.7. Podemos ver

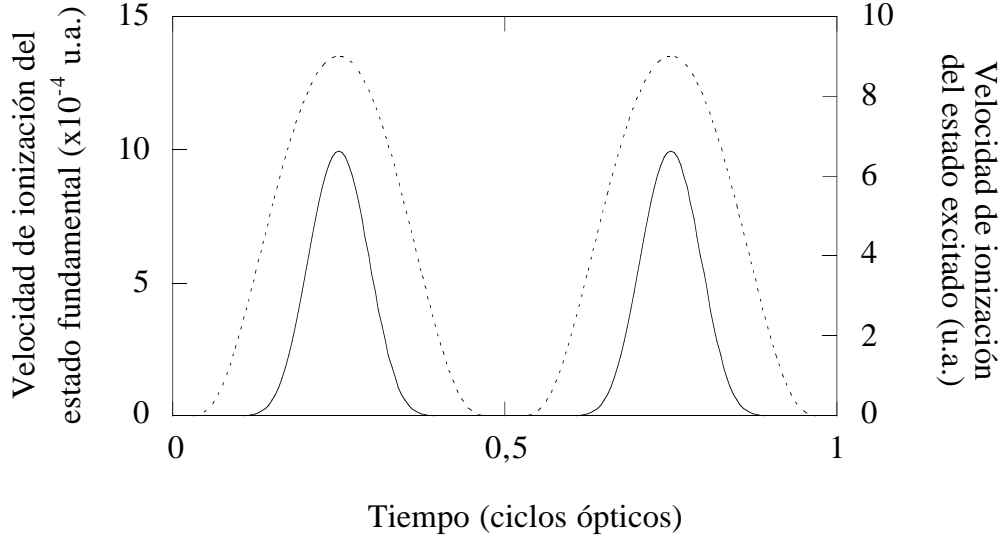


Figura 2.6: Tasas de ionización a lo largo de un ciclo para un campo sinusoidal de amplitud  $E_0 = 0.06$  u.a. En línea continua la correspondiente al nivel fundamental, dada por la fórmula (2.10) y en línea discontinua la del nivel excitado, dada por (2.11). Nótese la diferencia de escalas.

que el simple hecho de introducir una ionización dependiente del tiempo hace que aparezcan armónicos altos (en este caso hasta cerca del orden quincuagésimo) con intensidades mayores que los escasos picos del sistema de dos niveles. Los picos más intensos son los cercanos a la frecuencia de la transición entre los dos niveles.

Podemos entender mejor lo que está ocurriendo si atendemos a la evolución de las poblaciones y del momento dipolar, representados en la figura 2.8. La población del estado fundamental disminuye de forma casi monótona (no es así, aunque en la figura no se aprecien las pequeñas oscilaciones de Rabi) mientras que la del excitado varía de forma muy brusca, sin llegar nunca a superar el valor  $4 \times 10^{-3}$ . Estas agudas variaciones tienen máximos cuando el campo se hace cero. La repercusión de estas oscilaciones en el momento dipolar podemos observarla en la gráfica 2.8b, que explica por sí misma la generación de armónicos altos. Las oscilaciones del estado excitado se producen por el siguiente mecanismo: por efecto del campo externo

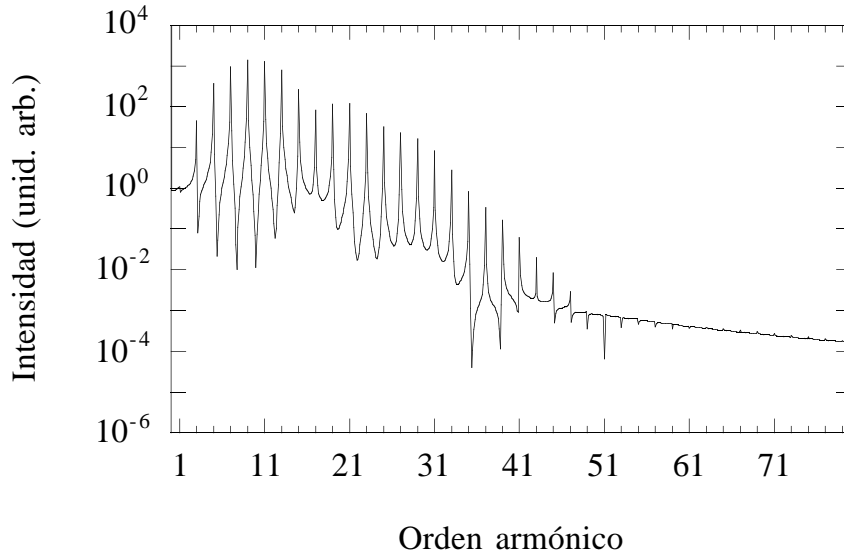


Figura 2.7: Espectro correspondiente a la solución de las ecuaciones (2.8) y (2.9) para un campo externo con los mismos parámetros que en la figura 2.2.

una pequeña parte de la población pasa del nivel fundamental al excitado y desde éste casi inmediatamente abandona el átomo debido a la altísima probabilidad de ionización. Precisamente cuando el campo es nulo, la tasa de ionización se hace cero y esto permite que en ese momento sobreviva algo de población en el nivel excitado, que rápidamente desaparecerá apenas aumente el módulo del campo. De este modo el nivel excitado actúa como un estado intermedio para que la población del nivel fundamental se ionice. En efecto, la población ionizada directamente desde el nivel fundamental es mucho menor que la que se ioniza desde el excitado, como podemos ver en la figura 2.9. La mucho mayor población que hay siempre en el estado fundamental no logra cancelar el efecto de la minúscula probabilidad de ionización desde él. De hecho, el espectro obtenido si despreciamos la ionización desde el primer nivel haciendo  $\gamma_0(t) = 0$  es prácticamente el mismo, para estos parámetros del campo.

Los armónicos altos podrían interpretarse desde el punto de vista adiabático

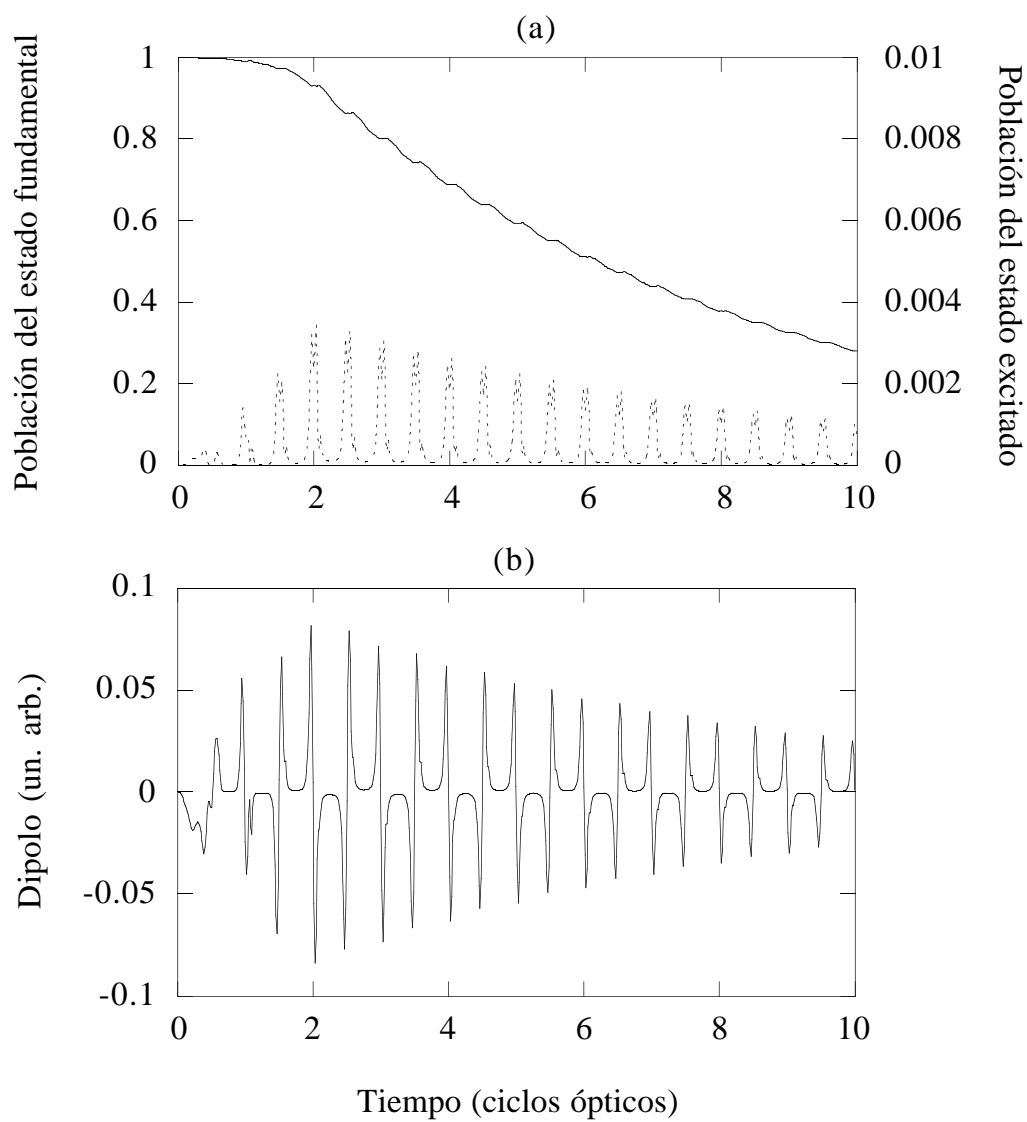


Figura 2.8: Lo mismo que en la figura 2.1 pero introduciendo la ionización dependiente del tiempo en los dos niveles.

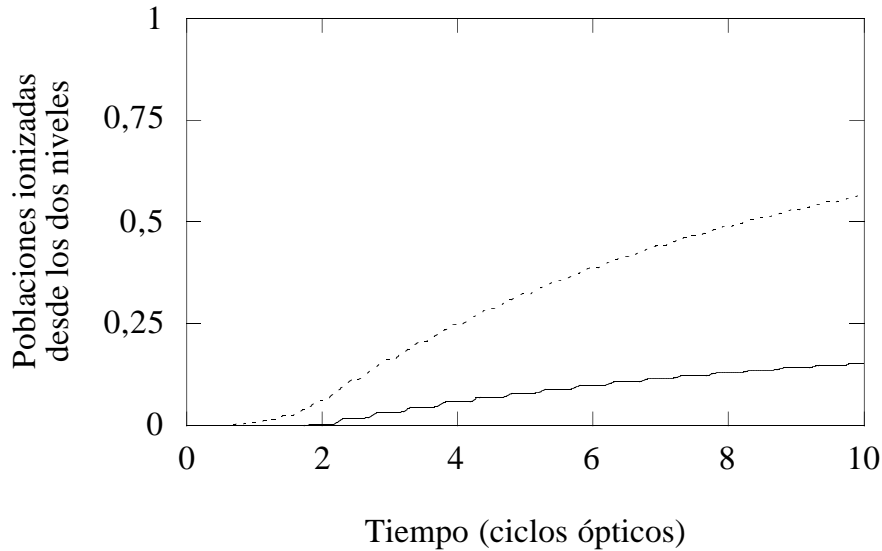


Figura 2.9: Poblaciones ionizadas desde el nivel fundamental (línea continua) y el excitado (línea de puntos) en el caso de la figura 2.8.

más arriba empleado. La introducción de las tasas de ionización equivaldría a un ensanchamiento dinámico de los niveles de energía por un término imaginario. Como este término es muy grande en el caso del nivel excitado cuando el campo se hace máximo o mínimo, las energías instantáneas de los niveles vestidos se ensanchan más allá de la frecuencia de la transición, pudiendo obtenerse armónicos de orden muy elevado.

Antes de seguir avanzando conviene recalcar que la generación de armónicos altos no depende de la forma concreta de las probabilidades de ionización, sino que existe siempre que éstas sean dependientes del tiempo. La forma de  $\gamma_1(t)$  dada por la expresión (2.11) puede plantear objeciones puesto que el nivel excitado está la mayor parte del tiempo en situación de supresión de barrera para la amplitud del campo que estamos utilizando. Podríamos utilizar en este caso una aproximación semiclásica identificando la ionización con el flujo de población que supera la barrera, siendo su velocidad el momento lineal de los electrones que quedan libres,

que viene dado por la diferencia de energía entre el nivel excitado y la altura de la barrera,  $p = \sqrt{2|V_{ef} + \omega_1|}$ . El máximo de la barrera de potencial dada por  $-1/x - E(t)x$  es  $V_{ef} = -2\sqrt{|E|}$  y  $\omega_1 = -\epsilon_2 = 0.125$  u.a. Cuando el campo es menor que el valor crítico clásico  $E_1^{(cr)} = 0.0039$  y el nivel excitado queda por debajo de la barrera podemos suponer que la ionización es despreciable. En este caso la tasa de ionización estará dada por [95]

$$\gamma_1^{(sc)}(t) = \sqrt{4|E(t)|^{1/2} - 2\omega_1} \Theta(|E(t)| > E_1^{(cr)}). \quad (2.12)$$

Esta expresión nos da una tasa de ionización más pequeña en el máximo que (2.11) pero tiene el inconveniente de que no es derivable en  $E_1^{(cr)}$ . Esto influye en el espectro de armónicos que se obtiene con ella y que podemos observar en la figura 2.10. De nuevo obtenemos armónicos altos, y en este caso su intensidad no va bajando sino que se mantiene hasta frecuencias muy altas sin haber un corte. Otro ejemplo más podemos verlo en la figura 2.11. En este caso hemos elegido la dependencia sencilla  $\gamma_1(t) \propto |E(t)|^2$  y vemos que hay menos armónicos pero también existen.

Podemos inferir entonces que es un hecho general el que una ionización que varíe rápidamente en el tiempo genera armónicos altos en un sistema de dos niveles, independientemente de su forma exacta. Este es un mecanismo alternativo al de las transiciones entre un estado ligado y uno del continuo de alta energía causantes, según los modelos explicados en la sección 1.4, de la meseta y la frecuencia de corte en los espectros en régimen de túnel y que inevitablemente deben ser tenidas en cuenta en cualquier modelo mínimamente realista.



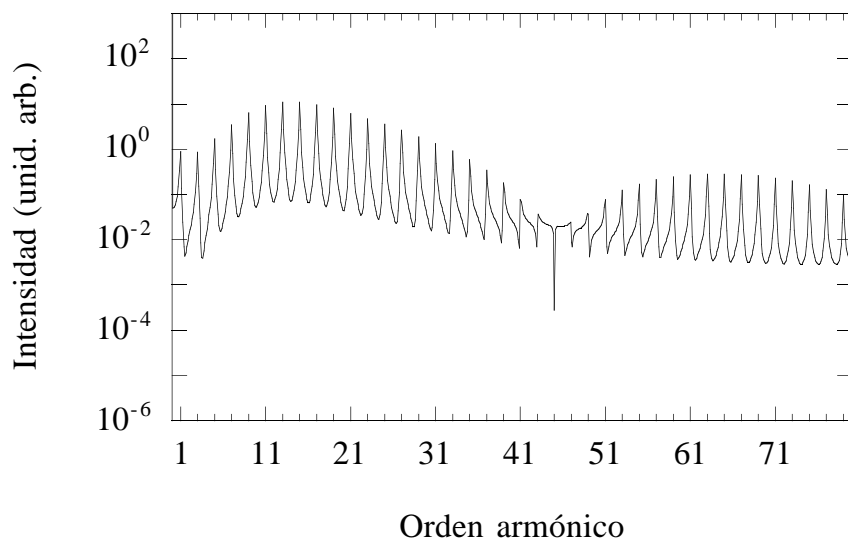


Figura 2.10: Espectro obtenido con la expresión (2.12) para la ionización desde el nivel excitado para un campo externo con los mismos parámetros que en la figura 2.7.

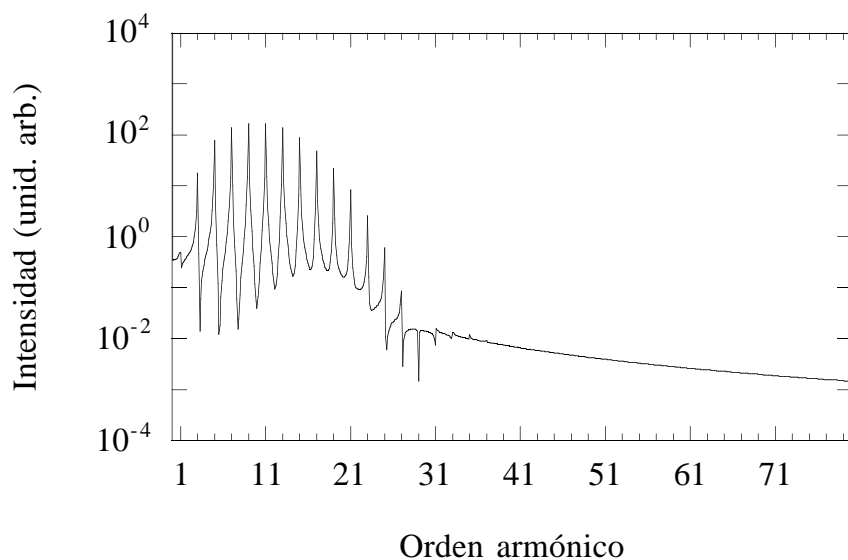


Figura 2.11: Espectro obtenido con una tasa de ionización desde el nivel excitado proporcional a  $|E(t)|^2$  para un campo externo con los mismos parámetros que en la figura 2.7.

## 2.3 Generación de armónicos en un sistema de dos niveles con ionización y recombinación [96]

Para recuperar la meseta de armónicos y la frecuencia de corte no hay más remedio que tener en cuenta las transiciones entre los estados del continuo de alta energía y los ligados. Nosotros vamos a hacerlo afinando aún más nuestro sistema de dos niveles de modo que incluya la recombinación, pero procurando que el modelo no se complique mucho para poder interpretar con sencillez los resultados. Supondremos que la parte de población que se ioniza pasa al continuo, evolucionando allí como una partícula clásica pero conservando como traza cuántica una fase que hará posible una recombinación coherente cuando retorne a la posición del núcleo. Explicaremos paso a paso el modelo [96].

Siguiendo las ecuaciones (2.8) y (2.9), la población que se ioniza desde el nivel  $|j\rangle$  (fundamental o excitado) en un intervalo de tiempo  $\Delta t$  es

$$\frac{\Delta P_j^{ion}}{\Delta t} = \gamma_j(t) |a_j(t)|^2. \quad (2.13)$$

En cada instante de tiempo esa población generará un paquete de ondas cuya amplitud será  $[\Delta P_j^{ion}]^{1/2}$  con un factor de fase adecuado. Esa fase podemos hallarla si admitimos que al estar en el régimen de túnel todo evoluciona adiabáticamente, por lo cual deberá ser la misma que tiene en ese instante el estado de partida salvo por un signo producido por la interacción con el campo y que cambia la paridad del estado. Explícitamente, la amplitud del paquete ionizado desde el estado  $|j\rangle$  entre  $t_0$  y  $t_0 + \Delta t$  será

$$a_j^{ion}(t_0; t_0) = [\Delta P_j^{ion}]^{1/2} \frac{a_j(t_0)}{|a_j(t_0)|} \frac{E(t_0)}{|E(t_0)|}. \quad (2.14)$$

Este paquete evoluciona como una partícula clásica sometida al campo externo de acuerdo con las ecuaciones (1.64)-(1.66). Despreciamos así el efecto del potencial

atómico sobre el paquete de ondas en el continuo, al igual que la variación del campo en el espacio, el campo magnético y demás efectos relativistas. Esto es justificable puesto que la intensidad del campo en el régimen de túnel es baja y la excursión de la partícula será mucho menor que la longitud de onda del láser, del mismo modo que su velocidad en comparación con la de la luz. Seguimos así en todo momento dentro del rango de validez de la aproximación dipolar. A partir de la expresión (1.72) obtenemos el cambio de fase de la partícula en el continuo, dado por la acción clásica,

$$\Phi(t_0, t) = \int_{t_0}^t dt' \left\{ \frac{\dot{x}(t')^2}{2} + I_j \right\}. \quad (2.15)$$

Estamos suponiendo, de acuerdo una vez más con nuestra visión adiabática, que la energía del estado no cambia durante la ionización y por ello el término de energía potencial en (2.15) es  $I_0 = 0$  para el estado fundamental e  $I_1 = \omega_T$  para el excitado. Esto va a repercutir en la frecuencia de corte de los armónicos, como veremos más adelante. Así pues, la evolución de cada paquete ionizado en el instante  $t_0$  será

$$a_j^{ion}(t_0; t) = a_j^{ion}(t_0; t_0) e^{-i\Phi(t_0, t)}. \quad (2.16)$$

Como ya sabemos, algunas de esas partículas-estado volverán a la posición del núcleo y otras no. Nos olvidamos de estas últimas, que no contribuirán a la generación de armónicos del átomo, y tenemos en cuenta únicamente las que vuelven y sólo la primera vez que lo hacen. Las sucesivas colisiones no tienen efecto en la frecuencia de corte de los armónicos y únicamente influyen de forma limitada en la intensidad de los de la meseta [97, 98]. Lo que suponemos es que en el momento de su vuelta interaccionan con los estados ligados como un tercer pseudonivel. Las ecuaciones de evolución son entonces

$$\frac{da_0(t)}{dt} = -\frac{\gamma_0(t)}{2} a_0(t) - iE(t)[d_{01}a_1(t) + d_{0c}a_0^{cont}(t)], \quad (2.17)$$

$$\frac{da_1(t)}{dt} = -\left(\frac{\gamma_1(t)}{2} + i\omega_T\right) a_1(t) - iE(t)[d_{01}a_0(t) + d_{1c}a_1^{cont}(t)], \quad (2.18)$$

donde las amplitudes de los estados del continuo que interactúan con el núcleo son

$$a_j^{cont}(t) = \int_0^t a_j^{ion}(t_0; t) \delta(x(t_0; t)) dx(t_0; t). \quad (2.19)$$

La delta de Dirac significa que sólo consideramos la recombinación de los estados ionizados cuando su trayectoria clásica,  $x(t)$ , cruza por el origen de coordenadas. Los elementos de matriz del momento dipolar entre los estados del continuo y los ligados se calculan suponiendo que los estados del continuo se comportan como ondas planas [23, 51] y su valor en nuestro caso es

$$d_{0c}(v) = i \frac{2^{7/2} \alpha^{5/4}}{\pi} \frac{v}{(v^2 + \alpha)^3}, \quad (2.20)$$

$$d_{1c}(v) = \frac{2^7 \alpha^{7/4}}{\pi} \frac{v^2}{(4v^2 + \alpha)^3 (v^2 + \epsilon_1)}, \quad (2.21)$$

donde  $\alpha$  es el doble del potencial de ionización y  $\epsilon_1$  la energía del nivel excitado.

La suposición de que la recombinación sólo se produce en el instante de tiempo en el que la partícula ionizada está en el origen nos lleva a subestimar la probabilidad de transición  $d_{jc}(v)\Delta t$  dado que el paso de tiempo numérico  $\Delta t$  es mucho menor que el tiempo de interacción, más aún si tenemos en cuenta el ensanchamiento de la función de onda durante su excursión en el vacío. Para remediarlo, corregimos ese término multiplicando  $d_{jc}(v)$  por  $T_i/\Delta t$ , donde  $T_i = l_{int}/v$  es el tiempo de interacción, proporcional a la longitud de interacción, que supondremos típicamente una unidad atómica. Para mayor simplicidad usaremos momentos dipolares constantes  $d_{jc} = d_{jc}(v_{prom})$ , donde la velocidad promedio de las partículas cuando vuelven por vez primera al núcleo es  $v_{prom} = 0.665E_0/\omega_0$ , resultado obtenido numéricamente. En cualquier caso la expresión concreta para el momento dipolar no influye de manera decisiva en nuestros resultados.

Pues bien, resolviendo las ecuaciones (2.17) y (2.18) para los parámetros de costumbre obtenemos un espectro como el de la figura 2.12. Podemos observar que los primeros armónicos son muy similares a los de la figura 2.7, en la que

habíamos incluido la ionización pero no la recombinación. La novedad son los armónicos más altos, que claramente tienen una estructura de meseta hasta una frecuencia de corte cercana al armónico quincuagésimo quinto, y a partir de ella decaen rápidamente en intensidad. El espectro nos recuerda el de un átomo real en el régimen de ionización por túnel. Podemos darnos cuenta además de que la posición de la frecuencia de corte coincide con la dada por la expresión  $\omega_T + 3.17U_p$ , ligeramente diferente a la de un átomo real,  $I_p + 3.17U_p$ . Esta diferencia viene de que consideramos que la energía potencial de los estados no varía durante la ionización y excursión en el continuo, siendo entonces la energía máxima de los electrones ionizados desde el nivel superior en el momento de la reinteracción con el núcleo precisamente  $\omega_T + 3.17U_p$ . Ya sabemos que esto puede corregirse si consideramos que los electrones no salen de  $x = 0$  sino de una posición algo distinta y que el ensanchamiento del paquete de ondas hace que la recolisión no sea tampoco en  $x = 0$ . Tener en cuenta estos aspectos haría que la posición de corte fuera algo más difusa. En cualquier caso, para los parámetros con que nos movemos, la diferencia entre  $I_p$  y  $\omega_T$  es de apenas dos o tres armónicos, prácticamente inapreciable. Podemos separar el efecto de la ionización dependiente del tiempo del de la recombinación coherente observando la figura 2.13, en la que hemos representado la intensidad de los armónicos obtenidos con las ecuaciones (2.17) y (2.18) tomando una expresión promediada independiente del tiempo para las tasas de ionización (véase la sección 1.2), que en nuestro caso resultan ser  $\gamma_0^{pr} = 4(3/\pi E_0)^{1/2} \exp(-2/3E_0)$ ,  $\gamma_1^{pr} = 2^{-11/2}(3/\pi)^{1/2} E_0^{-5/2} \exp(-1/12E_0)$ . En comparación con el caso general las intensidades de los primeros armónicos son mucho más bajas, mientras que las de los altos permanecen aproximadamente iguales, quedando claro que la forma concreta de esas tasas de ionización sólo tiene influencia destacada en los armónicos más bajos.

Podemos ver también, análogamente a los casos anteriores, la evolución de las

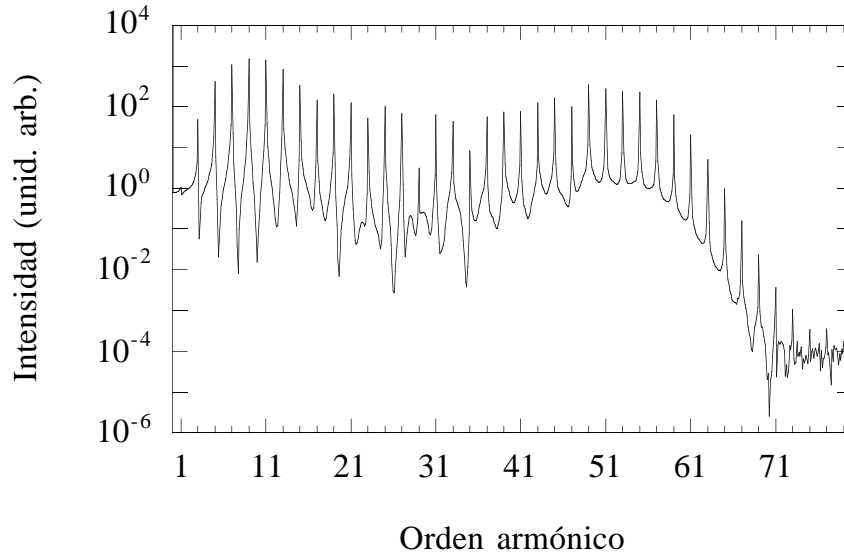


Figura 2.12: Espectro correspondiente a la solución de las ecuaciones (2.17) y (2.18) para un campo externo con los mismos parámetros que en la figura 2.2.

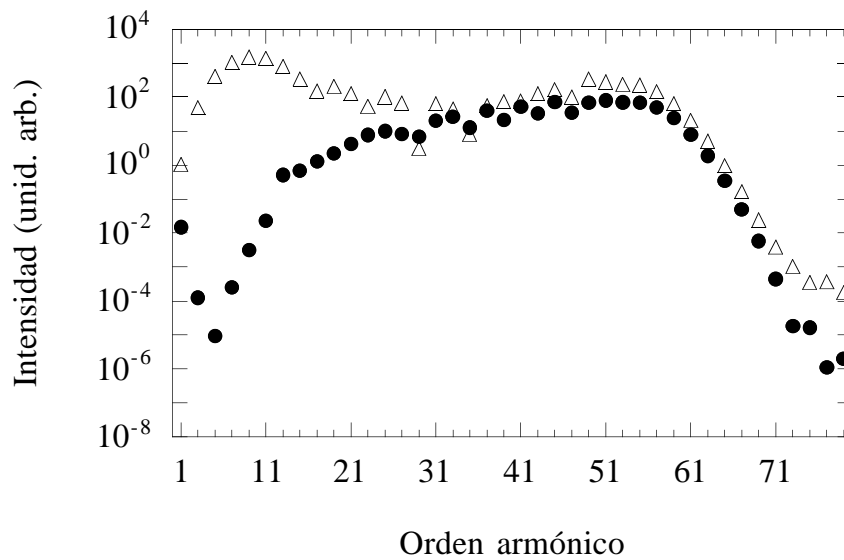


Figura 2.13: Intensidad de los armónicos obtenidos con tasas de ionización promediadas independientes del tiempo (círculos negros) y dependientes del tiempo (triángulos blancos).

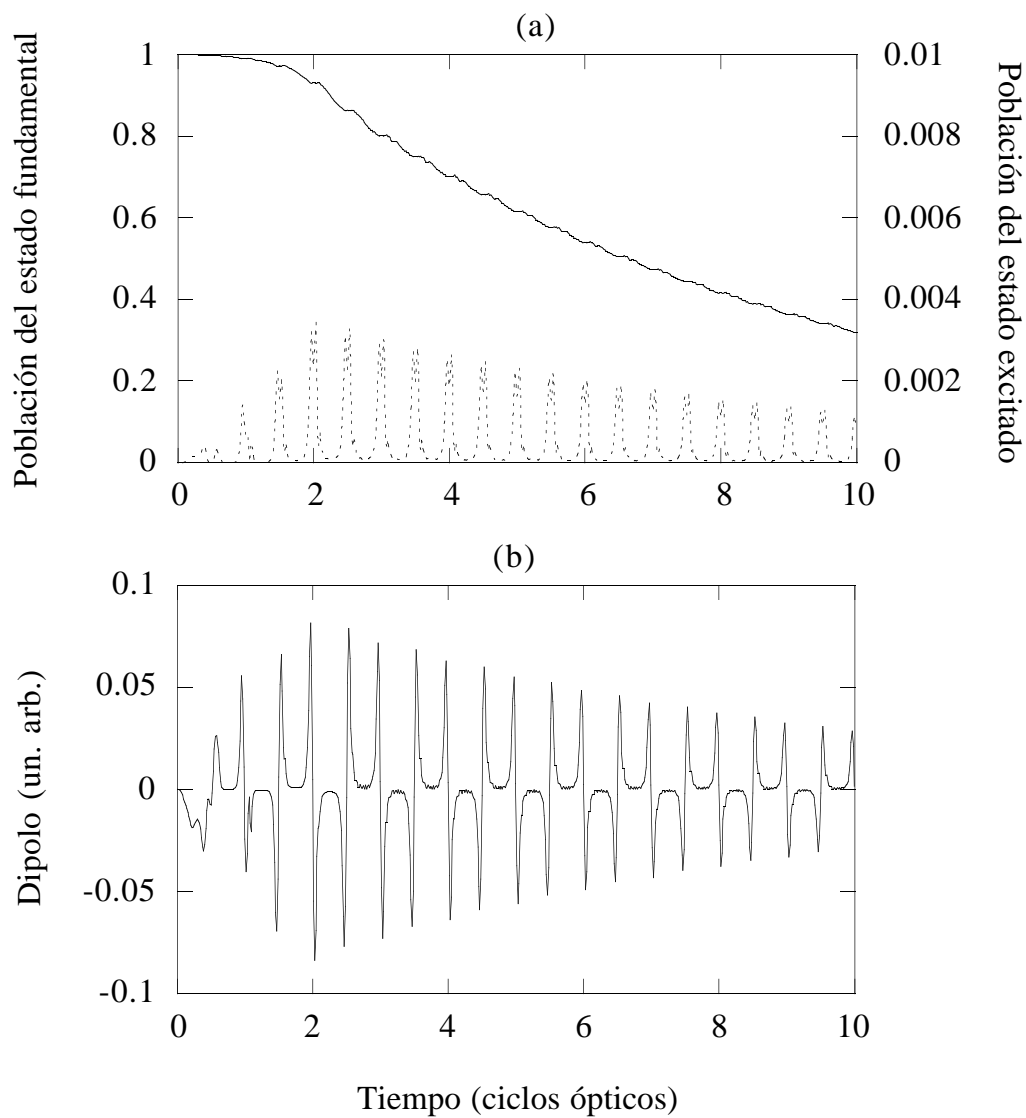


Figura 2.14: Evolución de las poblaciones (a) y el momento dipolar (b) cuando incluimos ionización y recombinación en nuestro modelo. Los parámetros del campo son  $E_0 = 0.06$  u.a. y  $\omega_0 = 0.04$  u.a.

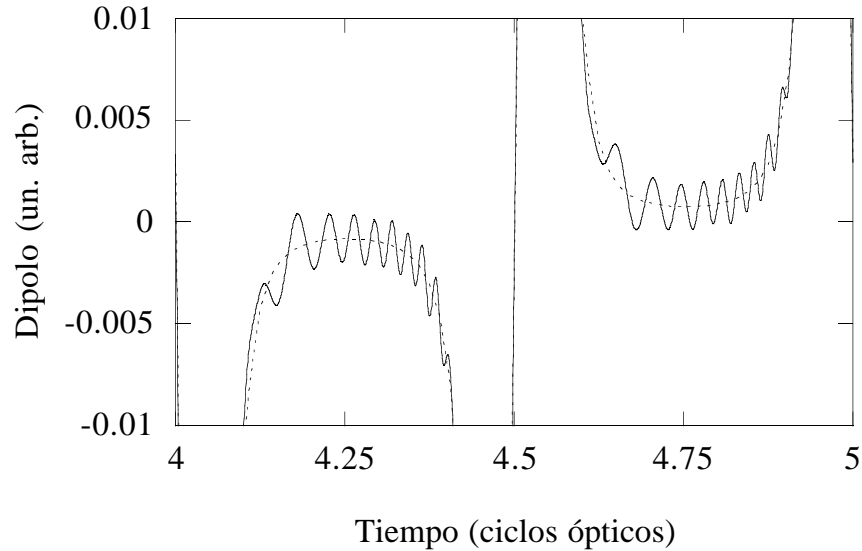


Figura 2.15: Detalle de la figura 2.14b. En línea de puntos el momento dipolar en ausencia de recombinación.

poblaciones y el momento dipolar. La figura 2.14 nos muestra estas variables. A primera vista son muy parecidas al caso en que sólo considerábamos la ionización (figura 2.8). En cuanto a las poblaciones, la diferencia con el caso anterior es mínima, siendo la población final del estado fundamental ligeramente superior, debido a la población que vuelve, y la del estado excitado casi igual. En cuanto al momento dipolar, la única variación son unas pequeñas oscilaciones cuando el dipolo es pequeño y que podemos apreciar con más detalle en la figura 2.15. Esas pequeñas oscilaciones son las causantes de la generación de los armónicos más altos, que nos dan la meseta y el corte.

El hecho de que la población que vuelve del continuo a los estados ligados sea tan pequeña nos lleva a pensar en una reinterpretación de la física de nuestro modelo. Normalmente los armónicos se han achacado a las transiciones desde el continuo a los estados ligados y las transiciones entre los estados ligados han sido despreciadas. Nosotros pensamos que el papel de estas transiciones es importante



debido a que los valores de los momentos dipolares entre estados ligados cercanos son órdenes de magnitud superiores a los de las transiciones entre estados ligados y estados del continuo [23]. Además de esto, la población ionizada está repartida entre todos los estados del continuo y la fracción de población en los estados relevantes, los que tienen energías cinéticas elevadas y generan los armónicos altos de la meseta, es muy pequeña. Podemos analizar esto con un poco más de detalle. El momento dipolar total de nuestro sistema tiene dos partes diferenciadas,  $d(t) = d_{b-b} + d_{b-c}$ , donde las contribuciones de la transición ligado-ligado y las ligado-contínuo son respectivamente

$$d_{b-b} = d_{01}(a_0 a_1^* + a_0^* a_1), \quad (2.22)$$

$$d_{b-c} = d_{0c}(a_0 a_0^{cont*} + a_0^* a_0^{cont}) + d_{1c}(a_1 a_1^{cont*} + a_1^* a_1^{cont}). \quad (2.23)$$

En la figura 2.16 podemos ver el espectro generado por cada una de las contribuciones. El de la transición ligado-ligado es en este caso unos cuatro órdenes de magnitud superior para los armónicos de la meseta, quedando clara su relevancia.

En nuestra opinión el mecanismo a través del cual se generan los armónicos es el siguiente: el acoplamiento entre los estados ligados y el continuo de alta energía induce oscilaciones rápidas en las amplitudes de los estados ligados. De este modo el momento dipolar entre ellos oscila con esas frecuencias altas, generando el espectro de armónicos. La transición ligado-ligado actúa así como resonador o amplificador de las pequeñas oscilaciones debidas a la recombinación coherente. El espectro de las transiciones ligado-contínuo también tiene por supuesto esas componentes altas, pero su contribución es significativamente más pequeña. En un átomo real incluso las transiciones entre los estados del continuo, que en nuestro modelo no están permitidas, generan un espectro con las mismas características que conocemos [99] pero en este caso también los elementos de matriz dipolares entre estados del continuo son más pequeños y su contribución es menor. Sólo cuando el pulso es mucho más largo que el tiempo necesario para que toda la

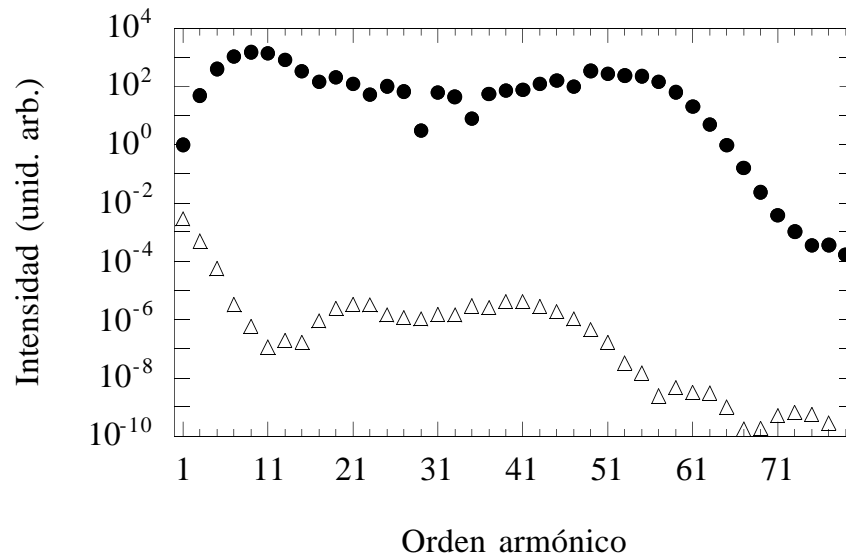


Figura 2.16: Intensidad de los armónicos generados por las contribuciones a la aceleración dipolar de las transición entre los estados ligados (círculos negros) y las transiciones entre los estados ligados y los del continuo (triángulos blancos), para los mismos parámetros del campo que la figura anterior.

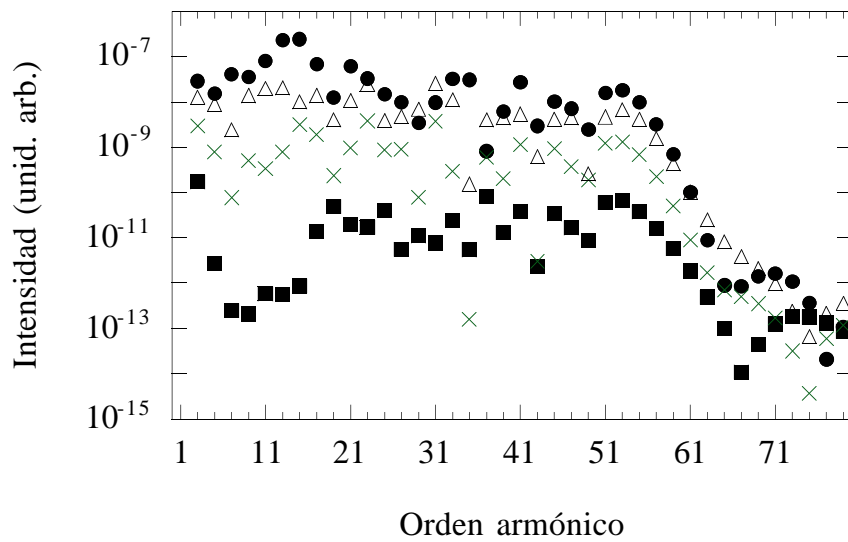


Figura 2.17: Intensidad de los armónicos generados por un potencial coulombiano (círculos negros) y un potencial de Yukawa con uno (cuadrados negros), dos (cruces) y cuatro (triángulos blancos) estados ligados con la misma energía del estado fundamental. Los parámetros del campo son  $E_0 = 0.06$ ,  $\omega_0 = 0.04$ .

población se ionice la contribución de los estados del continuo puede pasar a ser dominante en la generación de armónicos.

Otro apoyo a esta idea nos lo dan los cálculos de espectros realizados con potenciales de corto alcance con un número limitado de estados ligados. Becker y otros han estudiado la dinámica de un sistema con potencial de tipo delta de Dirac regularizado [100], obteniendo espectros cualitativamente iguales a los del hidrógeno real pero varios órdenes de magnitud menos intensos. Por su parte, Krause y otros [42] compararon los espectros del hidrógeno con los obtenidos por un potencial de tipo Yukawa,  $V(r) = -Ze^{-\alpha r}/r$ , con el que se pueden variar el número de estados ligados y el potencial de ionización sin más que cambiar los parámetros  $Z$  y  $\alpha$ . En la figura 2.17 podemos ver una comparación entre los armónicos del espectro del hidrógeno y el obtenido con el potencial de Yukawa con uno ( $Z = 1.93$  u.a.,  $\alpha = 1$  u.a.), dos ( $Z = 1.16$  u.a.,  $\alpha = 0.17$  u.a.) y cuatro ( $Z = 1.05$  u.a.,  $\alpha = 0.05$  u.a.) estados ligados y la misma energía del nivel fundamental que el hidrógeno. Cuando sólo existe un nivel ligado los armónicos son muy débiles, mientras que con cuatro estados ligados el parecido con el hidrógeno es bastante alto. Esto se debe no solamente a la presencia de resonancias que hacen que la ionización sea más eficiente sino a la amplificación de las oscilaciones por los dipolos entre los estados ligados que hemos descrito más arriba.

Para comprobar la validez de nuestro modelo vamos a contrastarlo con los resultados obtenidos con la ecuación de Schrödinger unidimensional con el potencial de Rochester descrita en la sección 1.4.3. Al ser la dinámica de nuestro modelo también unidimensional, pensamos que este es el mejor banco de pruebas. En este caso elegimos como parámetros en el potencial  $Z = 1$  u.a. y  $a_0 = 1.412$  u.a., que nos dan el estado fundamental en el nivel de energía  $I_p = 0.5$  u.a. El primer estado excitado tiene una energía diferente a la del hidrógeno y por ello en nuestro modelo debemos cambiar los parámetros a los nuevos  $\omega_T = 0.267$  u.a.,  $d_{01} = 1.297$  a.u.

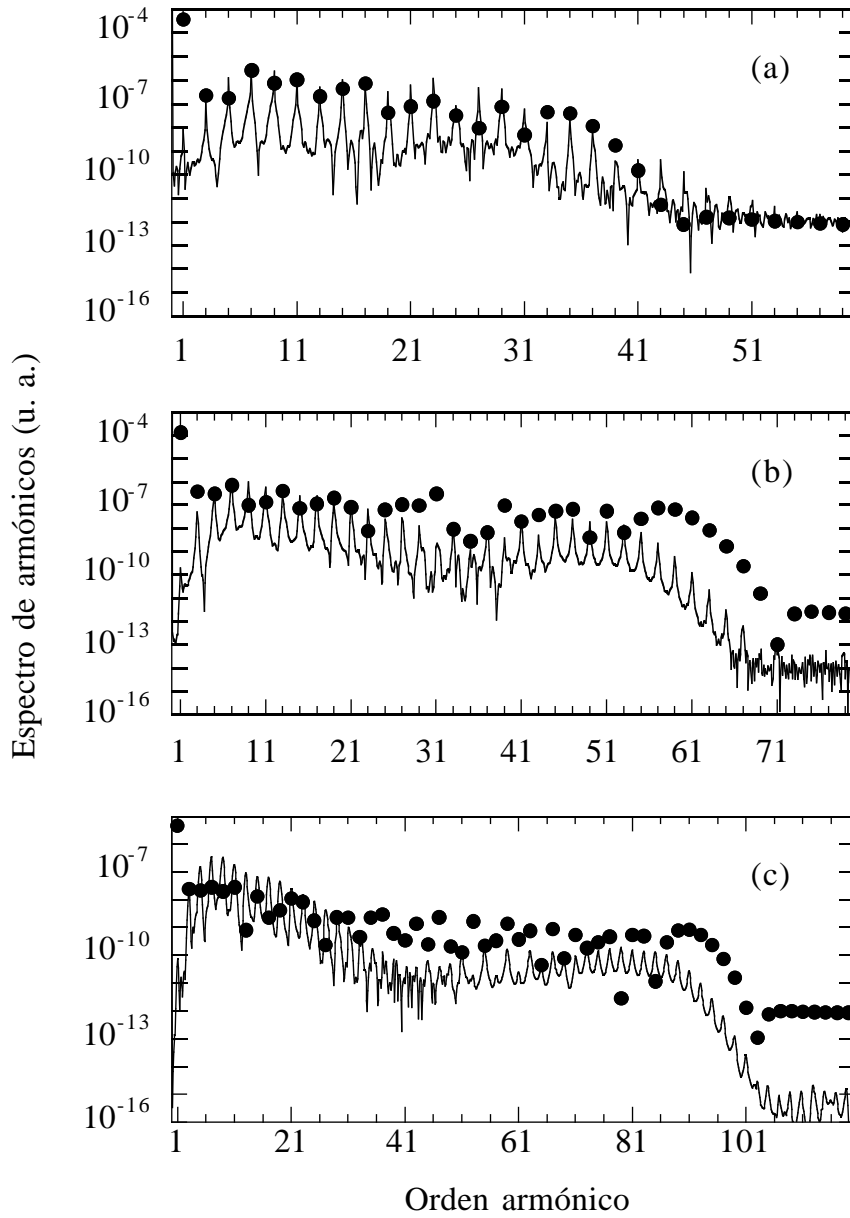


Figura 2.18: Comparación entre los armónicos generados en nuestro modelo (línea continua) y los obtenidos con la ecuación de Schrödinger unidimensional para campos con frecuencia  $\omega_0 = 0.04$  u.a. y amplitud  $E_0 = 0.04$  u.a. (a),  $E_0 = 0.06$  u.a. (b) y  $E_0 = 0.08$  u.a. (c).

En la figura 2.18 puede observarse la comparación entre los resultados de nuestro modelo y los obtenidos con la ecuación de Schrödinger unidimensional. No sólo la posición del corte es parecida, con la única diferencia del desplazamiento de energía potencial  $I_p - \omega_T$ , sino también las intensidades de los armónicos bajos e intermedios son en muchos casos similares. De hecho la mayor discrepancia está en el armónico fundamental y eso es debido a que nuestra aceleración dipolar no incluye el movimiento de los estados libres cuando están alejados del núcleo, que tiene la frecuencia del campo y que por supuesto sí que está incluido en la ecuación de Schrödinger. Un último dato que avala la importancia de las transiciones entre estados ligados es el hecho de que las contribuciones a la aceleración dipolar de la transición entre los dos primeros estados ligados es mucho mayor que la de las transiciones entre estos y el estado del continuo con momento  $k = \sqrt{6U_p}$  (aproximadamente el que da la frecuencia de corte) en el hidrógeno unidimensional, tal y como podemos observar en la figura 2.19. La primera contribución es del orden del espectro total, mientras que la segunda es varios órdenes de magnitud menos intensa.

Como resumen de este capítulo podemos decir que el papel de las transiciones entre estados ligados en la generación de armónicos en régimen de ionización por túnel es más importante que el que en un principio se les ha dado. Del mismo modo, el hecho de que la ionización no sea uniforme sino que varíe fuertemente a lo largo de un ciclo óptico es un mecanismo generador de armónicos adicional, que puede tener especial importancia en la intensidad de los armónicos bajos. El modelo de dos niveles abierto que hemos introducido nos ha dado bastante información sobre estos dos aspectos, pero hay que dejar muy claro que no es un modelo universal sino sólo aplicable en el régimen de túnel puesto que no tiene en cuenta los efectos de las transiciones multifotónicas ni de la supresión de barrera cuando el campo es más intenso, así como el efecto de otros niveles ligados. A pesar de estas limitaciones, es

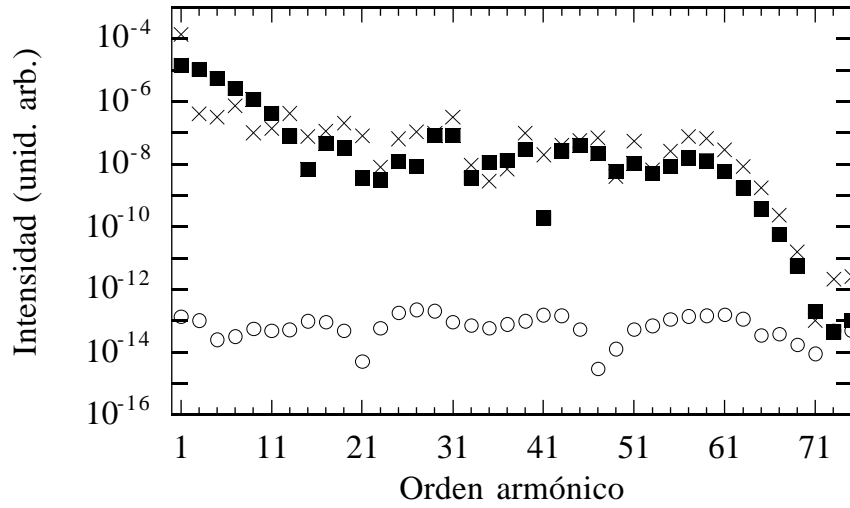


Figura 2.19: Intensidad de los armónicos generados en la ecuación de Schrödinger unidimensional para parámetros del campo  $E_0 = 0.06$  u.a. y  $\omega_0 = 0.04$  u.a. Las cruces representan la intensidad total, los cuadrados negros la contribución del dipolo entre los dos primeros estados ligados y los círculos blancos la contribución de los dipolos entre los dos primeros estados ligados y el del continuo con momento  $k = \sqrt{6U_p}$ .

aceptable cualitativamente y da unos resultados razonables cuando lo comparamos con la ecuación de Schrödinger unidimensional.





## Capítulo 3

# Simulación numérica de la interacción entre plasmas y pulsos láser

El objetivo de este capítulo es explicar los modelos y algoritmos que hemos utilizado para simular la interacción entre un medio ionizable y un campo electromagnético intenso. Nos centraremos en dos modelos bastante diferentes, uno de los llamados "partícula-en-celda", ampliamente utilizados en una gran variedad de problemas de la física de plasmas y otro mucho más sencillo pero que permite estudiar adecuadamente la generación y propagación de armónicos durante la ionización de un medio no muy denso con un campo relativamente débil.

### 3.1 Simulación de plasmas mediante códigos de partículas

En el campo de la simulación de plasmas hay dos posibilidades diferentes a la hora de abordar el problema. Una de ellas es la descripción del plasma como un fluido, olvidando completamente las características particulares de sus componentes. En este caso se resuelven las ecuaciones magnetohidrodinámicas del plasma, que variarán según sea el problema a abordar. La otra posibilidad es la descripción

cinética, que tiene en cuenta modelos más detallados del plasma que incluyen las interacciones de las partículas a través del campo electromagnético. Dentro de la descripción cinética puede optarse por resolver las ecuaciones cinéticas del plasma en el espacio de las fases (del tipo Vlasov o Fokker-Planck [74]) o bien la por la simulación de partículas aisladas, siguiendo la evolución de un conjunto de partículas que interactúan entre sí y con los campos externos. Cada una de estas descripciones tiene sus ventajas y sus inconvenientes. Los códigos magnetohidrodinámicos han sido útiles en problemas de gran escala relativos a dispositivos experimentales, pero carecen del grado de detalle suficiente para explicar los fenómenos físicos básicos cuando la distribución de energía de las partículas es muy diferente a una maxwelliana (por ejemplo en un plasma frío generado por fotoionización). En este caso la descripción con partículas es imprescindible. Lo mismo ocurre cuando las trayectorias de los electrones individuales se cruzan, es decir, cuando las colisiones son importantes. Por este motivo vamos a elegir nosotros en primera instancia la descripción con partículas, que conserva casi toda la física de los problemas reales a costa de encarecer los cálculos.

Vamos a resumir aquí las características generales de un código de partículas sin entrar en todos los detalles. La descripción será más minuciosa en lo referente al modelo concreto que hemos elegido nosotros. Hay en la literatura multitud de trabajos acerca de la simulación de plasmas con códigos de partículas, que en los últimos años se ha convertido en una disciplina más, y no de las menos importantes, de la física de plasmas. Nosotros remitimos al lector interesado a las referencias [74, 101, 102], que son las que nosotros hemos utilizado, para procurarse mayor información. Para un resumen de los más recientes avances en simulación de plasmas, puede verse por ejemplo la referencia [103].

La idea de describir un plasma mediante el movimiento de sus partículas parece de todo punto descabellada si consideramos el número de ellas que hay habitual-

mente en los experimentos (pensemos en cantidades superiores a  $10^{20}$  partículas en un volumen de un  $\text{cm}^3$ ) y que para cada una de ellas tenemos que resolver las ecuaciones de movimiento y las de Maxwell para hallar los campos que ellas mismas generan y los que nosotros aplicamos. Aún hoy es imposible con los ordenadores que tenemos aspirar a simular el movimiento de más de  $10^8$  partículas a lo largo de unos pocos ciclos ópticos en un tiempo razonable. ¿En qué consisten entonces los códigos de partículas tan utilizados y aceptados por la comunidad científica? La explicación es que las "partículas" de estos códigos no son partículas reales sino macropartículas o nubes de carga de tamaño finito que engloban a muchas partículas puntuales y que se mueven como un todo. Este truco de agrupar la carga en partículas grandes puede parecer injustificado, principalmente porque así se pierde la información sobre las colisiones entre partículas (muy perjudiciales en las simulaciones numéricas debido a la singularidad del potencial coulombiano), que serán muy frecuentes para densidades tan altas. Hay varias explicaciones que nos permiten justificar, hasta cierto punto, esta aproximación. En el caso de un plasma caliente, cuyas partículas tienen una distribución de velocidades inicial con una energía térmica, hay una longitud característica llamada longitud de Debye,  $\lambda_D = \sqrt{kT/4\pi e^2 N_0}$ . Esta longitud es la que define la distancia dentro de la cual los efectos partícula-partícula actúan más fuertemente y fuera de la cual dominan los efectos colectivos. Si nos interesan únicamente los efectos en una escala superior a  $\lambda_D$  podremos despreciar las colisiones entre partículas porque estarán apantalladas. El segundo argumento es que numéricamente es imposible considerar partículas puntuales puesto que estamos constreñidos por el tamaño de nuestra red espaciotemporal, así que, haciendo de la necesidad virtud, podemos aprovecharlo para que nuestras partículas tengan un tamaño superior a la longitud de Debye y en ese caso la sección eficaz de colisiones es mucho menor que en el caso de partículas de radio cero. En el caso de plasmas fríos la longitud de Debye sería

teóricamente nula y el campo microscópico no se apantallaría, pero podemos ir un poco más allá hacia el terreno de la física cuántica y pensar que los electrones tampoco son partículas puntuales sino paquetes de onda que, sometidos a los campos electromagnéticos, no sólo se desplazan sino que van ensanchándose, de forma que nunca va a haber colisiones entre partículas puntuales sino entre nubes de carga, mucho más suaves. En nuestro caso el espaciado de nuestra red será típicamente de diez o veinte unidades atómicas y el tamaño de las partículas igual o del mismo orden. El tiempo que tarda un paquete gaussiano libre en pasar de un tamaño de una unidad atómica (el del electrón en un átomo) a diez unidades atómicas es del orden de veinte unidades atómicas, la décima parte de un ciclo óptico para las frecuencias que manejamos, así que el tratarlo como una macro-partícula no es descabellado. Todas estas justificaciones no dejan de ser parciales y finalmente puede recurrirse al argumento de autoridad, que en este caso nos dice que las simulaciones de partículas han dado resultados muy buenos contrastados con los experimentos. Actualmente son aceptadas y sólo hay reticencias cuando los plasmas son muy supercríticos, con densidades de electrones varios órdenes de magnitud mayores que las de un sólido, que hacen que las colisiones binarias entre partículas sean decisivas en la dinámica del sistema.

En un código de partículas tenemos las siguientes variables:

- Posición  $\mathbf{r}_j$  y momento  $\mathbf{p}_j$  de cada partícula.
- Densidades de carga  $\rho_i$  y corriente  $\mathbf{J}_i$  en los puntos de la red espacial.
- Campos electromagnéticos  $\mathbf{E}_i$ ,  $\mathbf{B}_i$  en los puntos de la red espacial que deberán ser interpolados en la posición de cada partícula para hallar la fuerza a la que está sometida y poder moverla.

Por lo tanto, el código consiste en la repetición de un ciclo como el de la figura 3.1. Las variaciones aparecen cuando vamos a la resolución concreta de cada paso. En nuestro caso vamos a ceñirnos a un código unidimensional en el espacio

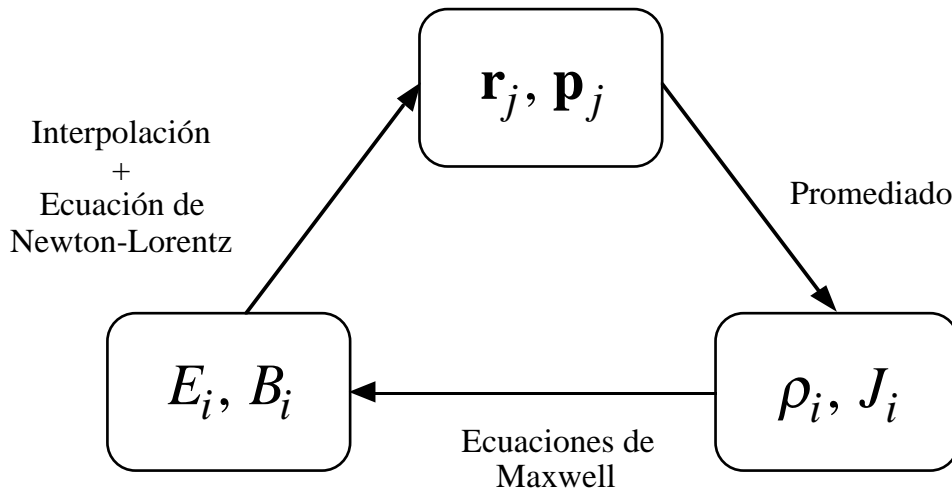


Figura 3.1: Ciclo básico de un código de partículas.

y bidimensional en la velocidad (1D2V). Explicaremos esto. Si hacemos incidir perpendicularmente una onda plana sobre una lámina delgada homogénea podemos suponer que todas las variaciones espaciales van a producirse en la dirección de propagación del campo porque en el plano transversal habrá simetría y todas las partículas del medio se moverán igual. En un experimento real tendremos un haz más o menos focalizado, pero si el espesor de la lámina es mucho menor que el tamaño del haz, cosa que puede lograrse en la práctica con láminas muy finas (se realizan experimentos con láminas de decenas de nanómetros) y con láseres muy intensos poco focalizados (con los láseres actuales es posible conseguir intensidades del orden de  $10^{18}$  W/cm<sup>2</sup>, que son las mayores que vamos a utilizar, en secciones de décimas de mm<sup>2</sup>), podemos hacer la aproximación de onda plana sin cometer un error fundamental. De este modo perderemos efectos típicamente transversales como el autoenfoco, formación de canales, etc. que ocurren a intensidades muy altas, fuera de nuestro interés. La geometría de nuestras simulaciones será la que puede verse en la figura 3.2, en la que el campo es una onda plana que se propaga en la dirección  $x$  y cuyo vector eléctrico está polarizado en la dirección  $y$ . El movimiento de las cargas se producirá entonces en el plano  $XY$ , con lo

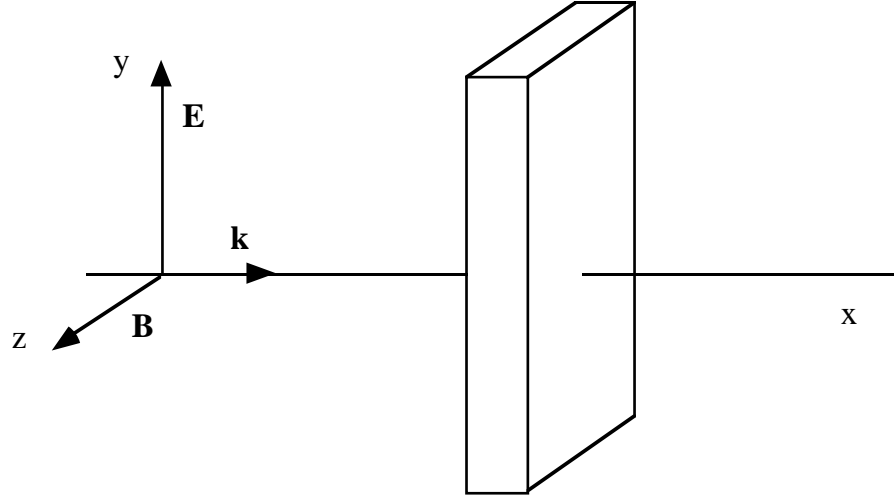


Figura 3.2: Esquema de la geometría de nuestras simulaciones.

cual no habrá componente de la velocidad  $v_z$ . Consideraremos que, debido a la simetría del problema, nuestras partículas son láminas de espesor  $a$  e infinitas en sus dimensiones transversales, es decir, serán placas en lugar de partículas. Por lo tanto nuestras únicas variables serán  $x$ ,  $v_x$  y  $v_y$ . De nuevo en esta sección y en la siguiente vamos a utilizar unidades gaussianas puesto que son más apropiadas que las atómicas.

Comencemos por la solución de las ecuaciones de movimiento para las partículas. Vamos a usar un método de tipo *salto de rana* (leapfrog en inglés), consistente en hallar posiciones y momentos en instantes de tiempo alternativos. Si tenemos las ecuaciones de movimiento

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = q \left[ \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right], \quad (3.1)$$

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}. \quad (3.2)$$

con  $\mathbf{p} = m\gamma\mathbf{v}$ , supondremos conocidos los momentos en el instante  $t - \Delta t/2$  y las posiciones y fuerzas en  $t$  y entonces avanzamos los momentos hasta  $t + \Delta t/2$  y las posiciones hasta  $t + \Delta t$ . Dentro de los métodos de *salto de rana* hay varios algoritmos posibles. Nosotros utilizamos el de Boris, que es rápido y reversible en

el tiempo [101]. Si llamamos  $\mathbf{u} = \gamma \mathbf{v}$ , con  $\gamma^2 = 1 + u^2/c^2$  la ecuación en diferencias finitas a resolver para cada momento es

$$\frac{\mathbf{u}^{n+1/2} - \mathbf{u}^{n-1/2}}{\Delta t} = \frac{q}{m} \left[ \mathbf{E}^n + \frac{1}{c} \frac{\mathbf{u}^{n+1/2} + \mathbf{u}^{n-1/2}}{2\gamma^n} \times \mathbf{B}^n \right]. \quad (3.3)$$

La forma más fácil de resolver esa ecuación es separar la parte de la fuerza que corresponde al campo eléctrico de la que corresponde al magnético. Esto se logra definiendo dos momentos intermedios  $\mathbf{u}^+$  y  $\mathbf{u}^-$  como

$$\mathbf{u}^- = \mathbf{u}^{n-1/2} + \frac{q\mathbf{E}^n \Delta t}{2m}, \quad (3.4)$$

$$\mathbf{u}^+ = \mathbf{u}^{n+1/2} - \frac{q\mathbf{E}^n \Delta t}{2m}. \quad (3.5)$$

$$(3.6)$$

Sustituyendo (3.4) y (3.5) en (3.3) obtenemos

$$\frac{\mathbf{u}^+ - \mathbf{u}^-}{\Delta t} = \frac{q}{2mc\gamma^n} (\mathbf{u}^+ + \mathbf{u}^-) \times \mathbf{B}^n. \quad (3.7)$$

Se observa que  $(\gamma^n)^2 = 1 + (u^-/c)^2 = 1 + (u^+/c)^2$  a segundo orden en  $\Delta t$ . La ecuación (3.7) no es más que una rotación de  $\mathbf{u}$  en torno al eje definido por  $\mathbf{B}$  un ángulo  $\theta = -2 \arctan(qB\Delta t/2mc\gamma)$ , que puede resolverse en dos pasos:

$$\mathbf{u}' = \mathbf{u}^- + \mathbf{u}^- \times \mathbf{t}, \quad (3.8)$$

$$\mathbf{u}^+ = \mathbf{u}^- + \mathbf{u}' \times \mathbf{s}, \quad (3.9)$$

siendo  $\mathbf{t} = q\Delta t\mathbf{B}/2mc\gamma^n$ ,  $\mathbf{s} = 2\mathbf{t}/(1 + t^2)$ . Una vez hallada  $\mathbf{u}^{n+1/2}$ , las posiciones se avanzan sencillamente como

$$\mathbf{r}^{n+1} = \mathbf{r}^n + \mathbf{v}^{n+1/2} \Delta t = \mathbf{r}^n + \frac{\mathbf{u}^{n+1/2} \Delta t}{\gamma^{n+1/2}}, \quad (3.10)$$

con  $\gamma^{n+1/2} = \sqrt{1 + (u^{n+1/2}/c)^2}$ . De este modo integramos las ecuaciones de movimiento de una forma rápida y efectiva. En nuestro caso sólo tendremos que avanzar

$v_x$ ,  $v_y$  y  $x$ . Veamos ahora cómo hallar las densidades de carga y corriente a partir de las posiciones y velocidades de las partículas.

En todas nuestras simulaciones vamos a suponer que los iones están fijos debido a que su masa será mucho mayor que la de los electrones y en los tiempos de duración de nuestros pulsos apenas se van a mover. Hemos comprobado los resultados incluyendo el movimiento de los iones y la variación, para nuestros parámetros, no es significativa. La densidad de carga positiva será entonces constante y la calculamos inicialmente (en el caso de un plasma preionizado) para que cancele exactamente la densidad inicial de cargas negativas, que estarán repartidas uniformemente a lo largo del espacio ocupado por la lámina. De este modo en cada paso sólo habrá que calcular la densidad de cargas negativas. El método que seguimos es una interpolación lineal. Pensemos que nuestras partículas tienen exactamente la misma anchura que el espaciado de la red,  $\Delta x$ , y que están uniformemente cargadas. Entonces repartimos su carga entre los dos puntos de la red más cercanos a su posición tal y como está esquematizado en la figura 3.3. Si una partícula está entre los puntos  $i$  e  $i + 1$ , exactamente en la posición  $(i + r)\Delta x$ , la cantidad de carga asignada al punto  $i$  será  $q_i = q(1 - r)$  y la asignada al punto  $i + 1$ ,  $q_{i+1} = qr$ . Este tipo de interpolación es lo que da nombre a estas simulaciones: partícula-en-celda (PIC). El efecto de la interpolación es suavizar las interacciones binarias entre partículas y disminuir el ruido en los resultados.

Una vez que hemos asignado por interpolación la carga de cada partícula a los correspondientes puntos de la red, la densidad de carga se halla sin más que sumar la carga total en cada punto y dividirla por el paso espacial. De este modo no hay que hacer más que un bucle sobre las partículas para tener la densidad de carga en todo los puntos de la red. En cuanto a la densidad de corriente, el procedimiento es el mismo y la única diferencia es que hay que multiplicar la carga por la correspondiente velocidad. También se utiliza una interpolación lineal



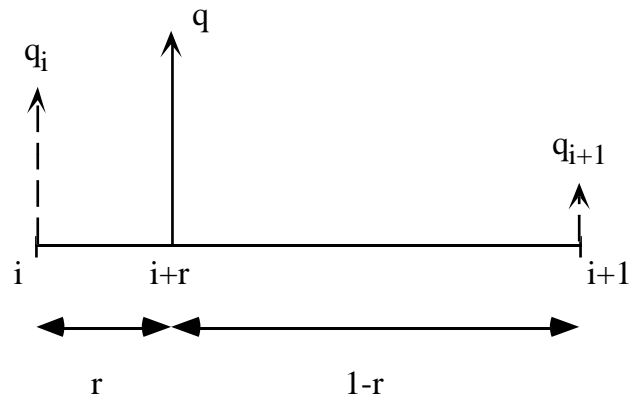


Figura 3.3: Esquema de la interpolación de la carga de una partícula de tamaño  $\Delta x$ .

idéntica a la explicada para hallar los campos en las posiciones de las partículas una vez que los tenemos en los puntos de la red tras resolver las ecuaciones de Maxwell. Precisamente el punto más conflictivo es la resolución de las ecuaciones de Maxwell, especialmente cuando la intensidad es alta y los efectos relativistas son importantes. Vamos a verlo en la siguiente sección.

### 3.2 Integración de las ecuaciones de Maxwell. Corrección relativista en los cálculos PIC [104]

A la hora de resolver las ecuaciones de Maxwell lo más habitual es utilizar directamente las ecuaciones para los campos eléctrico y magnético

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}, \tag{3.11}$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}, \tag{3.12}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 4\pi\rho, \tag{3.13}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \tag{3.14}$$

La solución de las ecuaciones de Faraday y Ampère es muy sencilla en nuestra

aproximación 1D2V, la de la ausencia de monopolos magnéticos es trivial y la ley de Coulomb se convierte en una ecuación algebraica en el espacio recíproco [101]. El problema reside precisamente en la ecuación (3.13), que es una ecuación no local instantánea, esto es, el campo longitudinal en un punto en un instante de tiempo depende de la densidad de carga en el entorno en ese mismo instante de tiempo. Evidentemente esto es así porque la solución de las ecuaciones de Maxwell incluye los términos retardado y avanzado. Este último puede llevar a errores en el caso relativista, que es cuando el retardo es más importante. Por ello nosotros preferimos integrar las ecuaciones de ondas para los potenciales (1.17) y (1.18) y elegir las soluciones retardadas, que en el caso de densidades de carga y corriente continuas y en el gauge de Lorentz pueden escribirse como [105]

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{\rho(\mathbf{r}', t')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Big|_{t'} d\mathbf{r}', \quad (3.15)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c} \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}', t')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Big|_{t'} d\mathbf{r}', \quad (3.16)$$

donde  $t' = t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c$ . Análogamente al caso de una sola partícula (1.24), la densidad de carga asociada a un conjunto discreto de cargas se escribe como

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, t) &= \int d\mathbf{r} \sum_m q_m \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_m(t)] \\ &= \int d\mathbf{r} \sum_m q_m \delta\left[\mathbf{r} - \mathbf{r}_m(0) - \int_0^t d\tau \mathbf{v}_m(\tau)\right]. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Lo normal en un código de partículas es calcular la densidad de carga a partir de la ecuación (3.17) discretizada en la malla espacial

$$\rho(\mathbf{r}_i, t) = \frac{1}{\Delta V} \sum_{x_m^\alpha = x_i^\alpha} q_m. \quad (3.18)$$

$\Delta V$  es el volumen de las celdas de la malla,  $i$  es el índice de dichas celdas y el sumatorio se extiende a todas las partículas cuya posición  $\mathbf{r}_m$  está dentro de la celda en el instante  $t'$ , es decir,  $x_m^\alpha = x_i^\alpha$ , en notación tetravectorial. Una vez

hallada de este modo la densidad de carga, la tentación es sustituirla en (3.15) y calcular el potencial escalar como

$$\phi(\mathbf{r}_i, t) = \sum_j \frac{\rho(\mathbf{r}'_j, t - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_j|/c)}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_j|} \Delta V, \quad (3.19)$$

que es una expresión manifiestamente errónea puesto que para una sola carga nos conduce al potencial de Coulomb retardado

$$\phi(\mathbf{r}_i, t) = \frac{q}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'(t')|}, \quad (3.20)$$

y sabemos que la expresión correcta nos la da el potencial de Liénard-Wiechert (1.28), en el que aparece el término de la velocidad de la partícula. Hemos llegado a (3.19) porque hemos supuesto implícitamente que la integral espacial de la delta de Dirac retardada en (3.17) es igual a la unidad, cuando en realidad

$$\int \delta[\mathbf{r}' - \mathbf{r}_m(t')] d\mathbf{r}' = \int \frac{1}{1 - \beta_m \cdot \mathbf{n}} \Big|_{t'(\mathbf{u})} \delta(\mathbf{u}) d\mathbf{u} \neq 1. \quad (3.21)$$

En el cálculo de los campos generados por las cargas en un código de partículas el retardo debe entonces incluirse de dos formas distintas. En primer lugar hay que utilizar las densidades de carga calculadas en los instantes de tiempo anteriores y en segundo lugar hemos de tener en cuenta el término de velocidad característico de los potenciales de Liénard-Wiechert. Una forma de hacer esto es hallar el potencial asociado a cada carga y calcular el potencial total como la suma de los individuales,

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \sum_m \phi_m(\mathbf{r}, t) = \sum_m \frac{1}{1 - \mathbf{v}_m(t'_m) \cdot \mathbf{n}_m(t'_m)/c} \frac{q_m}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_m(t'_m)|}. \quad (3.22)$$

Esta forma es absolutamente correcta pero va en contra de una de las más importantes ventajas de los códigos PIC, como es el calcular las densidades de carga y corriente asociadas a un conjunto de cargas y usarlas luego para hallar los campos asociados. De este modo sólo necesitamos un bucle de tamaño  $\mathcal{N}_p$ , donde  $\mathcal{N}_p$  es el número total de partículas, para tener las densidades de carga en toda la

mallas y otra de tamaño  $\mathcal{N}_g$ , donde  $\mathcal{N}_g$  es el número de puntos de la malla espacial, para integrar las ecuaciones de Maxwell en el espacio. En cambio, si hacemos uso de la ecuación (3.22) tendremos que hacer un bucle sobre todas las partículas para tener el potencial en un solo punto de la malla de coordenada  $\mathbf{r}$ . Esto nos exigiría un doble bucle de dimensión  $\mathcal{N}_p \times \mathcal{N}_g$  para poder tener el potencial en todos los puntos. Evidentemente el tiempo de cálculo se dispararía si nos viésemos obligados a hacer esto. Por suerte, podemos mejorar la situación haciendo una serie de aproximaciones.

El hecho de suponer que los iones se mantienen fijos simplifica un poco los cálculos, haciendo el potencial iónico,  $\phi_i(\mathbf{r})$ , constante en el tiempo, pero el método puede extenderse a iones móviles de forma automática. La densidad total de carga será entonces  $\rho(\mathbf{r}, t) = P(\mathbf{r}) - N(\mathbf{r}, t)$ , siendo  $P$  la densidad de carga positiva y  $N$  la negativa. Centrémonos entonces en ésta, que generará un potencial escalar  $\phi_e(\mathbf{r}, t)$  y un potencial vector  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  (los iones, al estar fijos, no contribuyen al potencial vector). En primer lugar descompongamos la suma de la ecuación (3.22) en sumas parciales de partículas que están en el mismo elemento de volumen en el mismo instante de tiempo ( $x_m^\alpha = x'^\alpha$ ). Si suponemos que la carga de todas las partículas es la misma, cosa habitual en las simulaciones de plasmas preformados, pero no cierta cuando hay ionización y cada partícula tiene una carga diferente, tendremos

$$\phi_e(\mathbf{r}, t) = - \int d\mathbf{r}' \frac{N(\mathbf{r}', t')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_m| \mathcal{N}(\mathbf{r}', t')} \sum_{\substack{m \\ x_m^\alpha = x'^\alpha}} \frac{1}{1 - \mathbf{v}_m(t') \cdot \mathbf{n}/c}, \quad (3.23)$$

donde  $\mathcal{N}(\mathbf{r}, t)$  es el número de partículas que comparten el mismo elemento de volumen en el instante  $t$ . Si definimos la velocidad promedio de las partículas en cada celda como

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}', t') = \frac{1}{\mathcal{N}(\mathbf{r}', t')} \sum_{\substack{m \\ x_m^\alpha = x'^\alpha}} \mathbf{v}_m(t'), \quad (3.24)$$

tendremos que  $\mathbf{v}_m(t') = \mathbf{v}(\mathbf{r}, t') + \Delta\mathbf{v}_m(t')$ . El término de velocidad en el denominador de (3.23) puede expresarse como una serie de Taylor en  $\Delta\mathbf{v}_m(t')/c$

$$\frac{1}{1 - \mathbf{v}_m(t') \cdot \mathbf{n}/c} \simeq \frac{1}{1 - \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{n}/c} \times \left\{ 1 + \frac{\Delta\mathbf{v}_m(t') \cdot \mathbf{n}/c}{1 - \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{n}/c} + \left[ \frac{\Delta\mathbf{v}_m(t') \cdot \mathbf{n}/c}{1 - \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{n}/c} \right]^2 + \dots \right\} \quad (3.25)$$

En la suma en (3.23) el primer término de la serie de Taylor nos da  $\mathcal{N}(\mathbf{r}', t')$  y el segundo se anula por definición de  $\Delta\mathbf{v}_m(t')$ . El tercero contiene la suma

$$\sum_{\substack{m \\ x_m^\alpha = x'^\alpha}} (\Delta\mathbf{v}_m(t') \cdot \mathbf{n})^2 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m \\ x_m^\alpha = x'^\alpha}} \Delta v_m^2(t') = \frac{3\mathcal{N}(\mathbf{r}', t')}{2m} k_B T(\mathbf{r}', t'), \quad (3.26)$$

donde hemos supuesto que las fluctuaciones en la velocidad son isótropas y hemos introducido una temperatura local dependiente del tiempo y no relativista  $T(\mathbf{r}, t)$  [106].  $k_B$  es la constante de Boltzmann. Quedándonos a segundo orden la aproximación al potencial escalar útil para nuestros cálculos sería

$$\phi_e(\mathbf{r}, t) \simeq - \int \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \frac{N(\mathbf{r}', t')}{1 - \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{n}/c} \left\{ 1 + \frac{3k_B T(\mathbf{r}', t')/2mc^2}{[1 - \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{n}/c]^2} \right\} d\mathbf{r}'. \quad (3.27)$$

En principio esta expresión es válida únicamente si  $|\Delta\mathbf{v}(t)| < c - v(t)$ . Para las partículas más rápidas que la media la dinámica relativista nos asegura esa condición. En cambio, la distribución de velocidades en régimen relativista es muy asimétrica y puede haber partículas con velocidades bastante inferiores a la media que no cumplan la condición anterior. Pese a todo, como para ellas el término en el denominador es más grande, esas partículas lentas contribuirán mucho menos a la integral.

En cuanto al potencial vector, podemos escribirlo como

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = - \int d\mathbf{r}' \frac{N(\mathbf{r}', t')}{c|\mathbf{r} - \mathbf{r}_m|} \frac{1}{\mathcal{N}(\mathbf{r}', t')} \sum_{\substack{m \\ x_m^\alpha = x'^\alpha}} \frac{\mathbf{v}(t') + \Delta\mathbf{v}_m(t')}{1 - [\mathbf{v}(t') + \Delta\mathbf{v}_m(t')] \cdot \mathbf{n}/c}. \quad (3.28)$$

Definiendo la densidad de corriente como

$$\begin{aligned}\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) &= \sum_{\substack{m \\ x_m^\alpha = x'^\alpha}} q_m \mathbf{v}_m(t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ &= \sum_{\substack{m \\ x_m^\alpha = x'^\alpha}} q_m \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\mathbf{v}(t') + \Delta \mathbf{v}_m(t')] = -\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) N(\mathbf{r}, t),\end{aligned}\quad (3.29)$$

tendremos que el primer término en la suma de la ecuación (3.28) nos da la contribución de la velocidad promedio al potencial vector

$$\mathbf{A}_v(\mathbf{r}, t) \simeq \int \frac{1}{c|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}', t')}{1 - \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{n}/c} \left\{ 1 + \frac{3k_B T(\mathbf{r}', t')/2mc^2}{[1 - \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{n}(t')/c]^2} \right\} d\mathbf{r}'. \quad (3.30)$$

En cuanto al segundo término de la suma, podemos escribirlo como

$$\sum_{\substack{m \\ x_m^\alpha = x'^\alpha}} \frac{\Delta \mathbf{v}_m(t')}{1 - [\mathbf{v}(t') + \Delta \mathbf{v}_m(t')] \cdot \mathbf{n}/c} \simeq \sum_{mx_m^\alpha = x'^\alpha} \frac{\Delta \mathbf{v}_m(t') (\Delta \mathbf{v}_m(t') \cdot \mathbf{n})}{[1 - \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{n}/c]^2}, \quad (3.31)$$

y, para una distribución isótropa de la fluctuación de la velocidad, obtener

$$\mathbf{A}_{\Delta v}(\mathbf{r}, t) \simeq - \int \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \frac{N(\mathbf{r}', t') \mathbf{n}}{[1 - \mathbf{v}(t') \cdot \mathbf{n}(t')/c]^2} \frac{3 k_B T(\mathbf{r}', t')}{2 mc^2}. \quad (3.32)$$

El potencial vector total será entonces  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_v(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}_{\Delta v}(\mathbf{r}, t)$ . Estas expresiones que hemos hallado serán útiles para cálculos tridimensionales con plasmas relativistas fríos o calientes, siempre que sean válidas las aproximaciones que hemos utilizado. Nosotros estamos interesados en un caso mucho más sencillo: un plasma frío y un medio unidimensional. La primera condición simplifica notablemente las expresiones, sin más que hacer  $T(\mathbf{r}, t) = 0$ . En particular el término  $\mathbf{A}_{\Delta v}(\mathbf{r}, t)$  es nulo. En cuanto a la segunda, intentemos hallar unas expresiones adecuadas para los potenciales unidimensionales.

Para un plasma frío podemos escribir la ecuación (3.27) en coordenadas cilíndricas  $(\rho, \varphi, x)$  (ver figura 3.4) como

$$\begin{aligned}\phi_e(x, t) &\simeq - \int dx' \int \int \rho d\rho d\varphi \frac{N^2(x', t')}{R} \\ &\times \left[ N(x', t') + J_x(x', t') \frac{x-x'}{Rc} + J_y(x', t') \frac{\rho \cos \varphi}{Rc} + J_z(x', t') \frac{\rho \sin \varphi}{Rc} \right]^{-1},\end{aligned}\quad (3.33)$$

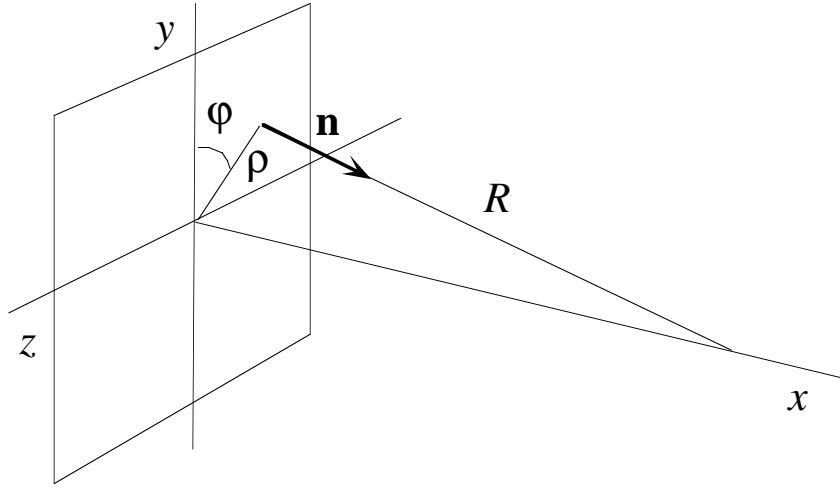


Figura 3.4: Geometría del problema unidimensional en coordenadas cilíndricas.

donde como siempre  $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  y hemos usado (3.29) y  $\mathbf{n} = (\mathbf{r} - \mathbf{r}')/R$ . Como  $R = c(t - t')$  y en el plano  $x'$  constante se verifica que  $RdR = \rho d\rho$ , tendremos que

$$\begin{aligned} \phi_e(x, t) \simeq & -c^2 \int dx' \int_{-\infty}^{t-|x-x'|/c} dt' \int_0^{2\pi} d\varphi N^2(x', t') \\ & \times \left\{ cN(x', t') + J_x(x', t')\zeta + [J_y(x', t') \cos \varphi + J_z(x', t') \sin \varphi] \sqrt{1 - \zeta^2} \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (3.34)$$

siendo  $\zeta = (x - x')/[c(t - t')]$ . La integral sobre el azimut puede resolverse de forma sencilla para obtener

$$\begin{aligned} \phi_e(x, t) \simeq & -2\pi c^2 \int dx' \int_{-\infty}^{t-|x-x'|/c} dt' N^2(x', t') \\ & \times \left\{ [cN(x', t') + J_x(x', t')\zeta]^2 - [J_y^2(x', t') + J_z^2(x', t')] [1 - \zeta^2] \right\}^{-1/2}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

De forma análoga se halla la expresión para el potencial vector, que resulta ser

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(x, t) \simeq & -2\pi c \int dx' \int_{-\infty}^{t-|x-x'|/c} dt' N(x', t') \mathbf{J}(x', t') \\ & \times \left\{ [cN(x', t') + J_x(x', t')\zeta]^2 - [J_y^2(x', t') + J_z^2(x', t')] [1 - \zeta^2] \right\}^{-1/2}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Podemos darnos cuenta de que tanto el potencial escalar como cada componente del potencial vector pueden escribirse de la forma

$$\Lambda(x, t) \simeq \int dx' \mathcal{F}_\Lambda(x', x, t - |x - x'|/c) \quad (3.37)$$

donde  $\mathcal{F}_\Lambda(x', x, t - |x - x'|/c)$  es la correspondiente integral en el tiempo. Resulta claro entonces que pese a nuestra aproximación unidimensional, la integración de los potenciales es un problema bidimensional puesto que depende de dos variables,  $x$  y  $x'$ . Esta bidimensionalidad refleja la anisotropía del campo inducida por la velocidad relativista. Hay situaciones en las que podemos reducir las ecuaciones (3.35) y (3.36) a un problema unidimensional. Consideremos una lámina de plasma muy fina cuya radiación queremos observar a una distancia mucho mayor que su espesor. Entonces  $R \gg |x - x'|$  en casi todo el dominio de integración sobre el que se extiende  $\mathcal{F}_\Lambda(x', x, t - |x - x'|/c)$ . Tendremos entonces que podemos aproximar (3.35) por

$$\phi_e(x, t) \simeq -2\pi \int dx' \int_{-\infty}^{t-|x-x'|/c} \frac{c^2 N^2(x', t') dt'}{\left\{ c^2 N^2(x', t') - [J_y^2(x', t') + J_z^2(x', t')] \right\}^{1/2}}, \quad (3.38)$$

y de forma análoga las componentes del potencial vector. Precisamente en el caso que nos interesa el campo eléctrico externo es transversal y es de esperar que las cargas se muevan principalmente en el plano transversal, por lo cual  $|J_y^2(x', t') + J_z^2(x', t')| > |J_x^2(x', t')|$ , que es otro argumento a favor de nuestra aproximación. Hemos reducido entonces el problema a solucionar cuatro ecuaciones del tipo

$$\Lambda(x, t) = \int dx' \mathcal{F}_\Lambda \left( x', t - \frac{|x - x'|}{c} \right), \quad (3.39)$$

que son muy fáciles de resolver numéricamente. Para hacerlo descomponemos las integrales en una parte que se propaga hacia la derecha y otra hacia la izquierda. Si la red espacial se extiende en el intervalo  $[0, L]$ , cada integral la calcularemos como  $\Lambda(x, t) = \Lambda^+(x, t) + \Lambda^-(x, t)$ , donde

$$\Lambda^+(x, t) = \int_0^x dx' \mathcal{F}_\Lambda \left( x', t - \frac{|x - x'|}{c} \right), \quad (3.40)$$

$$\Lambda^-(x, t) = \int_x^L dx' \mathcal{F}_\Lambda \left( x', t + \frac{|x - x'|}{c} \right). \quad (3.41)$$



Eligiendo los pasos espacial y temporal de forma que  $\Delta x = c\Delta t$  tendremos que

$$\Lambda^+(x + \Delta x, t + \Delta t) = \Lambda^+(x, t) + \int_x^{x+\Delta x} dx' \mathcal{F}_\Lambda \left( x', t - \frac{|x - x'|}{c} \right). \quad (3.42)$$

El cálculo de la integral entre  $x$  y  $x + \Delta x$  a segundo orden es

$$\int_x^{x+\Delta x} dx' \mathcal{F}_\Lambda \left( x', t - \frac{|x - x'|}{c} \right) \simeq \frac{\Delta x}{2} [\mathcal{F}_\Lambda(x, t) + \mathcal{F}_\Lambda(x + \Delta x, t + \Delta t)], \quad (3.43)$$

y análogamente tendremos para la parte que se propaga de derecha a izquierda

$$\Lambda^-(x - \Delta x, t + \Delta t) = \Lambda^-(x, t) + \int_{x-\Delta x}^x dx' \mathcal{F}_\Lambda \left( x', t + \frac{|x - x'|}{c} \right), \quad (3.44)$$

resolviéndose la integral como

$$\int_{x-\Delta x}^x dx' \mathcal{F}_\Lambda \left( x', t + \frac{|x - x'|}{c} \right) \simeq \frac{\Delta x}{2} [\mathcal{F}_\Lambda(x, t) + \mathcal{F}_\Lambda(x - \Delta x, t + \Delta t)]. \quad (3.45)$$

Las condiciones de contorno son  $\Lambda^+(0, t) = 0$ ,  $\Lambda^-(L, t) = 0$ . En cuanto a  $\mathcal{F}_\Lambda(x, t)$ , sabemos que en todos los casos es una integral del tipo

$$\mathcal{F}_\Lambda(x, t) = \int_{t_0}^t dt' g_\Lambda(x, t'), \quad (3.46)$$

donde  $t_0$  es el instante inicial y  $g_\Lambda(x, t)$  es una función de las densidades de carga y corriente. Podemos propagar entonces la integral haciendo simplemente

$$\mathcal{F}_\Lambda(x, t + \Delta t) = \mathcal{F}_\Lambda(x, t) + \Delta t g_\Lambda \left( x, t + \frac{\Delta t}{2} \right). \quad (3.47)$$

Aprovechamos que, debido al método de *salto de rana*, conocemos las velocidades y por tanto la densidad de corriente en los instantes "semienteros" de tiempo para utilizarlas en  $g_\Lambda(x, t + \Delta t/2)$ . En cuanto a la densidad de carga, tomamos  $N(x, t + \Delta t/2) = 1/2[N(x, t) + N(x, t + \Delta t)]$ . De este modo calculamos los potenciales de una forma sencilla y rápida. Para calcular los campos utilizamos las ecuaciones (1.20) y (1.21), que para nuestra geometría se reducen a

$$E_x = -\frac{\partial}{\partial x} \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} A_x, \quad (3.48)$$

$$E_y = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} A_y + E_{0y}, \quad (3.49)$$

$$B_z = \frac{\partial}{\partial x} A_y + B_{0z}, \quad (3.50)$$

donde  $E_{0y}$ ,  $B_{0z}$  son las componentes eléctrica y magnética del campo incidente, que tendrán la forma  $E_{0y}(x, t) = B_{0z}(x, t) = E_0 S(\eta) \sin(\eta)$ , con  $\eta = \omega_0 t - k_0 x$  y  $S$  una envolvente que a partir de ahora, salvo que digamos lo contrario, tendrá forma de función seno cuadrado. Las ecuaciones (3.48)-(3.50) las resolvemos transformando las derivadas en incrementos finitos a primer orden.

Antes de pasar a otra cosa vamos a estimar la importancia de las correcciones relativistas que hemos introducido en el código para ver en qué rango de parámetros debemos tenerlas en cuenta. Para ello hemos hecho unas simulaciones en las que incidimos con un pulso de frecuencia  $\omega_0 = 0.05$  u.a. (lo que equivale a una longitud de onda  $\lambda_0 \simeq 0.9 \mu\text{m}$ ) y duración veinte ciclos ópticos sobre una lámina de espesor  $0.1\lambda_0$  (para que la aproximación hecha en la ecuación (3.38) sea correcta) de un plasma preformado en equilibrio cuya densidad es 1.65 veces la crítica. En cada caso hemos resuelto los potenciales con la corrección de Liénard-Wiechert-ecuación (3.38) y análoga para el potencial vector- y sin ella, usando simplemente los potenciales de Coulomb retardados, lo que equivale a suponer  $v/c \ll 1$  y por tanto  $J/c \ll N$ , es decir, quedarnos con las expresiones

$$\phi_e(x, t) \simeq -2\pi c \int dx' \int_{-\infty}^{t-|x-x'|/c} N(x', t') dt', \quad (3.51)$$

$$\mathbf{A}(x, t) \simeq 2\pi \int dx' \int_{-\infty}^{t-|x-x'|/c} \mathbf{J}(x', t') dt'. \quad (3.52)$$

La contribución de las cargas positivas es en cualquier caso

$$\phi_p(x, t) \simeq 2\pi c \int dx' \int_{-\infty}^{t-|x-x'|/c} P(x', t') dt'. \quad (3.53)$$

En la figura 3.5 podemos ver el espectro de armónicos del campo transmitido a través de la lámina (a) y reflejado por ella (b) cuando la amplitud del campo es moderada (1 u.a.). Observamos que la diferencia cuando introducimos la corrección de Liénard-Wiechert (línea discontinua) con respecto al cálculo con los potenciales de Coulomb retardados (línea continua) es mínima, aunque en el campo transmitido los armónicos son un poco más intensos, al contrario que en el reflejado.

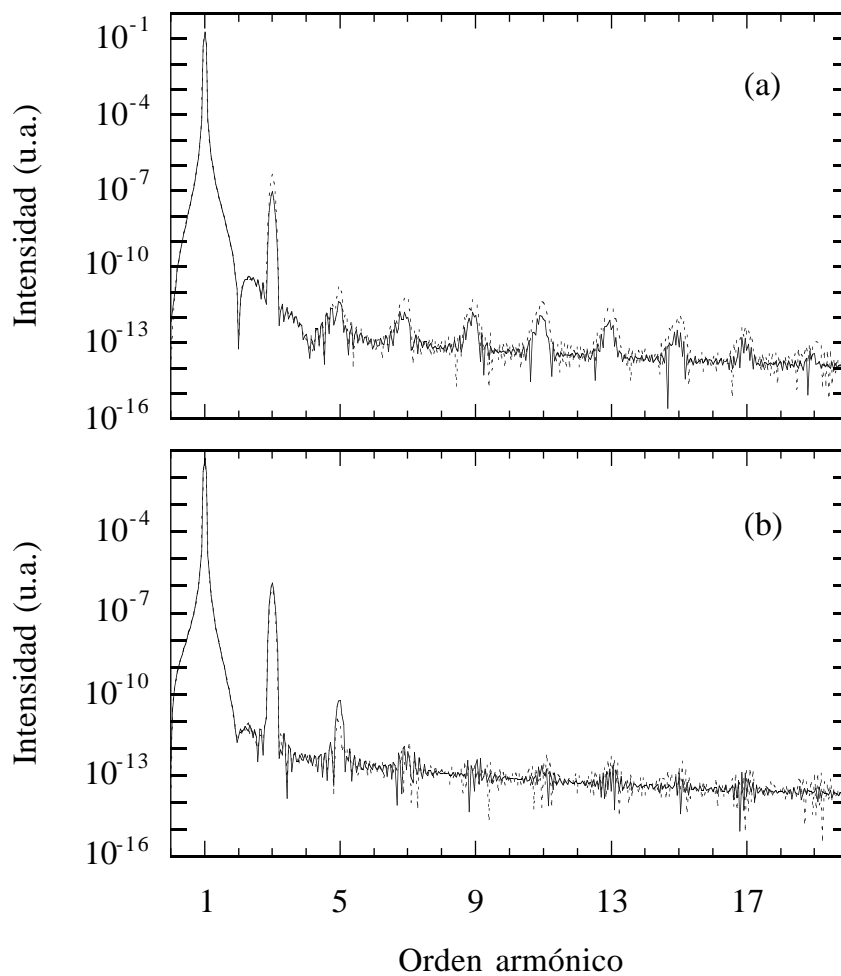


Figura 3.5: Espectro de armónicos del campo transmitido (a) y reflejado (b) en una lámina delgada cuando realizamos el cálculo de los potenciales incluyendo (línea de puntos) y sin incluir (línea continua) la corrección de Liénard-Wiechert. El pulso incidente tiene una frecuencia  $\omega_0 = 0.05$  u.a., una duración de veinte ciclos con envolvente en forma de seno cuadrado y una amplitud  $E_0 = 1$  u.a.

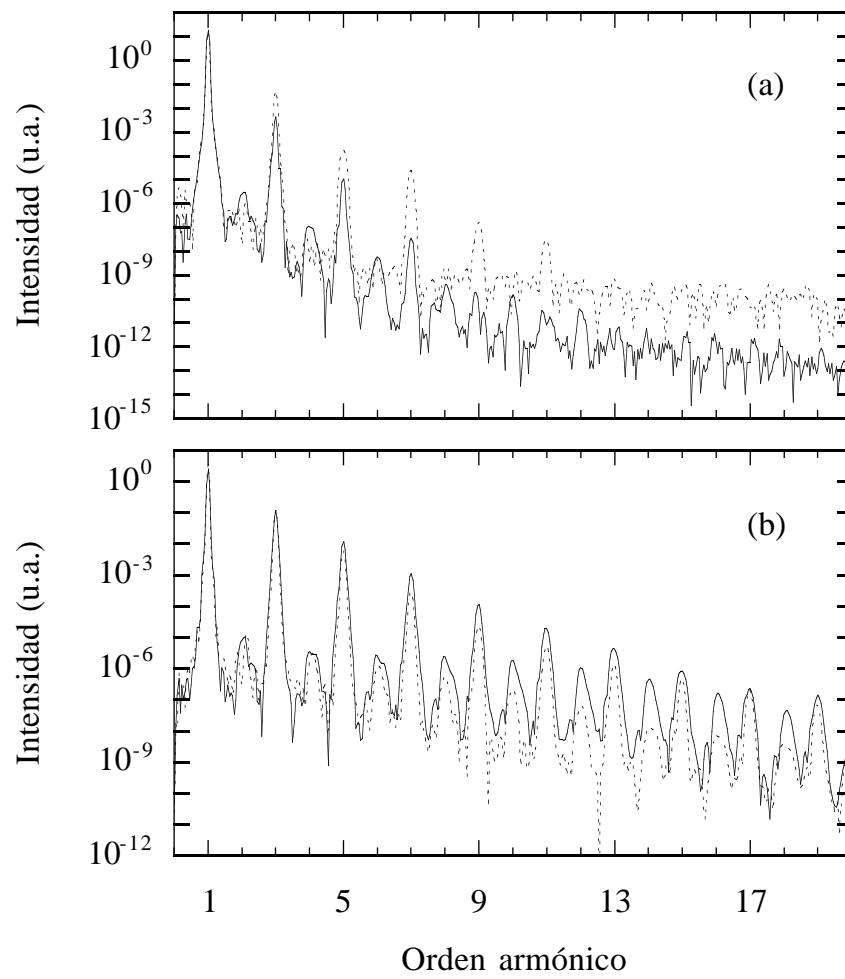


Figura 3.6: Lo mismo que la figura 3.5 pero con un pulso de amplitud  $E_0 = 10$  u.a.

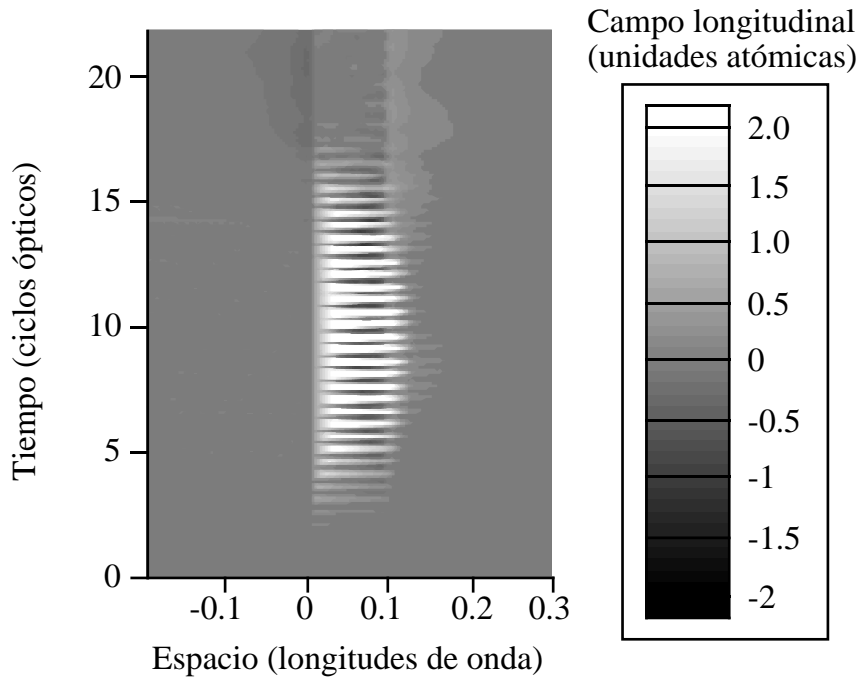


Figura 3.7: Evolución espaciotemporal del campo longitudinal  $E_x$  para un campo incidente de amplitud máxima  $E_0 = 10$  u.a. cuando no consideramos la corrección de Liénard-Wiechert en los potenciales.

Los perfiles del campo transmitido y el reflejado parecen idénticos y por eso no los representamos. Podemos concluir entonces que para el régimen poco relativista al que corresponden estos parámetros la corrección de Liénard-Wiechert no es importante y podemos prescindir de ella.

Si incrementamos la amplitud del campo un orden de magnitud, hasta  $E_0 = 10$  u.a., con lo que la intensidad aumenta cien veces ( $I_0 \approx 4 \times 10^{18}$  u.a.) las cosas cambian bastante, como podemos observar en la figura 3.6. En este caso el aumento en la intensidad de los armónicos transmitidos al incluir la corrección de Liénard-Wiechert es de varios órdenes de magnitud, mientras que los reflejados son menos intensos. Para aclarar lo que ocurre podemos recurrir a las figuras 3.7 y 3.8. En la primera hemos dibujado la evolución del campo longitudinal  $E_x$  a lo largo del espacio (eje horizontal) y del tiempo (eje vertical) en las simulaciones anteriores

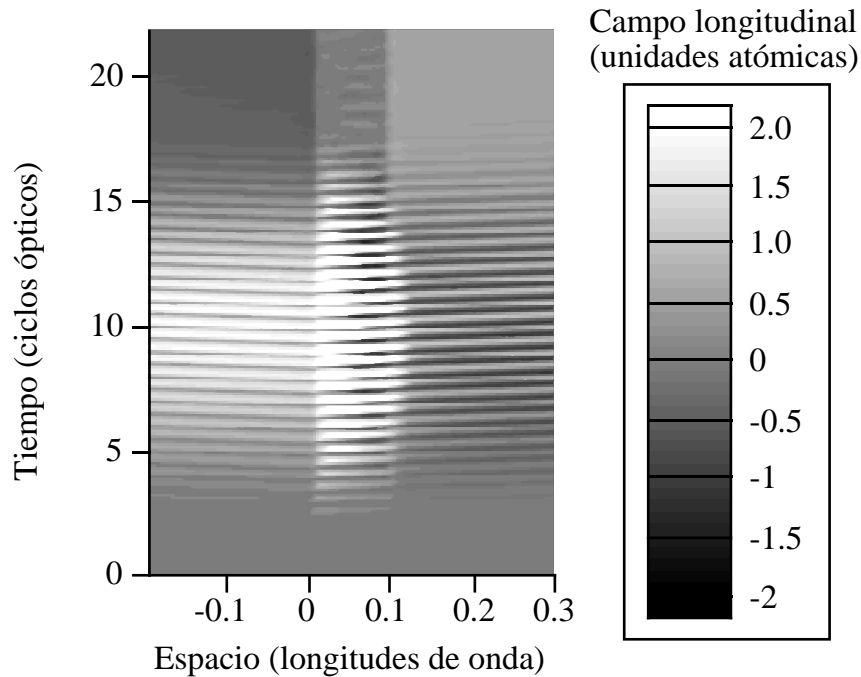


Figura 3.8: Lo mismo que en la figura 3.7 pero introduciendo la corrección de Liénard-Wiechert.

cuando utilizamos únicamente los potenciales de Coulomb retardados. Se observan las oscilaciones del campo en la zona central del pulso, cerca de su máximo. Estas oscilaciones están restringidas al espacio ocupado por la lámina (entre  $x = 0$  y  $x = 0.1\lambda_0$ ) y son el resultado del movimiento de los electrones debido al término  $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  de la fuerza de Lorentz, el mismo mecanismo que como ya sabemos genera los armónicos. Cuando el campo externo vuelve a decrecer, las oscilaciones se amortiguan y el campo longitudinal va disminuyendo. La figura 3.8 representa el mismo campo cuando tenemos en cuenta la corrección de Liénard-Wiechert. Ahora las oscilaciones del campo longitudinal son mucho más intensas debido a la ruptura de la simetría del potencial coulombiano. Recordemos que el campo generado por una partícula relativista en movimiento tenía dos contribuciones -ecuación (1.30)-, la de velocidad, o campo cercano, que tenía una dependencia con la distancia al punto de observación del tipo  $R^{-2}$  y la de aceleración, o campo lejano, que decae

como  $R^{-1}$ . Esta última es la que se considera generalmente como el campo de radiación porque es la de más largo alcance y por ello podemos detectarla. En nuestro caso es más interesante el campo de velocidad, que en una lámina delgada es el que sienten las partículas próximas a otra en movimiento. Este campo, para una partícula aislada, puede escribirse en función de su posición instantánea y en tiempo no retardado en el sistema del laboratorio como [31]

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{q\mathbf{n}}{\gamma^2 R^2 [1 - \beta^2 \sin^2 \psi]^{3/2}}, \quad (3.54)$$

donde  $\psi = \arccos(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v})$ . Este campo es muy anisótropo debido a que la carga efectiva observada en la dirección ortogonal al desplazamiento de la partícula es mucho mayor que la carga en reposo. En nuestro caso las partículas se desplazan principalmente en la dirección del campo eléctrico externo, es decir, a lo largo del eje  $y$ . Por ello, la carga efectiva observada en la dirección  $x$  fluctúa entre su valor en reposo y otro bastante mayor. Cuando esta carga efectiva es mayor, los iones, que están fijos (o al menos se mueven mucho más lentamente) y por tanto tienen carga efectiva constante, no pueden compensar el exceso de carga negativa y por lo tanto el campo longitudinal se dispara debido a esta no neutralidad transitoria. El resultado es el aumento de las oscilaciones del plasma y por tanto de la radiación secundaria. Además, debido a la no neutralidad, hay un campo longitudinal residual que logra propagarse a cierta distancia de la lámina.

Vemos por tanto que la corrección de Liénard-Wiechert puede ser importante para campos muy intensos, pero para campos cuya amplitud es del orden de la unidad atómica o inferior, su influencia es débil. Por ello y a fin de simplificar los cálculos, a partir de ahora vamos a prescindir de dicha corrección y todas nuestras simulaciones las haremos con los potenciales de Coulomb retardados.

### 3.3 Ionización en un código PIC

Hasta ahora no hemos hablado para nada de la ionización, que es el punto clave de nuestro trabajo. Para incluirla en un código de partículas habrá que introducir en el bucle de la figura 3.1 un paso adicional en el que calculemos la ionización del medio e introduzcamos las correspondientes partículas. Nosotros hacemos esto justo después de hallar los campos resolviendo las ecuaciones de Maxwell y antes de mover las partículas. Partimos de una configuración inicial en la que a cada punto de la lámina le asignamos una carga ligada  $Q_0$  y la correspondiente densidad  $N_b(x, 0) = N_0 = Q_0/\Delta x$ . Tanto la carga positiva como la negativa libres son nulas (podríamos partir también de una situación de ionización parcial, pero no hemos considerado esta posibilidad aquí). A cada paso temporal calculamos la densidad de carga que se ioniza a partir de la ecuación

$$\frac{\partial}{\partial t} N_b(x, t) = -W(x, t)N_b(x, t), \quad (3.55)$$

donde  $W$  es la tasa de ionización. Tendremos entonces que la densidad de carga que se ioniza entre  $t$  y  $t + \Delta t$  será  $\Delta N_b(x, t + \Delta t) = W(x, t)N_b(x, t)\Delta t$ . Una vez que sabemos la cantidad de carga ionizada creamos una partícula de carga  $q = \Delta N_b(x, t + \Delta t)\Delta x$  y la colocamos en el punto de la malla correspondiente a la posición  $x$ . Al mismo tiempo aumentamos la densidad de carga positiva en dicho punto lo mismo que disminuye la densidad de carga ligada.

Todo nuestro trabajo se centra en el efecto de la fotoionización. Debido a esto vamos a considerar que la tasa de ionización está determinada exclusivamente por el campo eléctrico, es decir, despreciamos la ionización por colisiones entre electrones e iones. La ionización por colisiones puede ser importante en determinados regímenes y a tiempos relativamente largos. En nuestro caso el principal motivo para despreciar la ionización por colisiones es que este tipo de ionización depende de la sección eficaz de las colisiones y esta es más importante cuanto más grandes



son los iones. Nosotros vamos a considerar los iones más ligeros, los de hidrógeno, para los cuales la probabilidad de ionización por colisiones es muy baja, como vamos a ver. Hay que explicar que elegimos el hidrógeno por la simplicidad de las probabilidades de ionización para dicho átomo, que ya conocemos, y porque al ser un átomo con un solo electrón libre hay únicamente una etapa de ionización, lo que simplifica mucho los cálculos. Tomaremos como tasa de ionización la expresión más sencilla, dada por la fórmula (1.3) con la amplitud del campo variable en tiempo y espacio, que es la expresión más utilizada en la literatura:

$$W(x, t) = \frac{4}{|E(x, t)|} \exp\left(-\frac{2}{3|E(x, t)|}\right), \quad (3.56)$$

donde volvemos a utilizar unidades atómicas. La tasa de ionización por colisiones vendrá dada por la expresión [107]  $W_{col} = N\bar{v}\sigma(\bar{v})$ , donde  $N$  es la densidad de electrones,  $\bar{v}$  la velocidad media, que para nosotros será  $\bar{v} = |J/N|$  y  $\sigma(\bar{v})$  la sección eficaz de colisiones, que depende de la velocidad de los electrones incidentes. No hay una expresión teórica universal para las secciones eficaces de colisiones puesto que dependen de bastantes factores. Normalmente se utilizan interpolaciones de datos experimentales ajustados a curvas sencillas. Lo habitual es elegir una sección del tipo [108, 109]

$$\sigma(K) = \frac{1}{I_p K} \left[ A \ln\left(\frac{K}{I_p}\right) + \sum_{i=1}^N B_i \left(1 - \frac{I_p}{K}\right)^i \right], \quad (3.57)$$

donde  $K$  es la energía cinética del electrón,  $I_p$  el potencial de ionización del átomo o ion y  $A$ ,  $B_i$  constantes propias de cada especie. Para el hidrógeno basta tomar cuatro términos en el sumatorio para obtener una sección eficaz con una fiabilidad del 7%. Los datos concretos son:  $I_p = 13.6$ ,  $A = 0.1845$ ,  $B_1 = -0.0186$ ,  $B_2 = 0.1231$ ,  $B_3 = -0.1901$  y  $B_4 = 0.9527$ .  $I_p$  está dado evidentemente en electronvoltios y las unidades de las demás constantes son  $10^{-13}\text{eV}^2\text{cm}^2$ .

Podemos ver el valor de la tasa de fotoionización en función de la amplitud del campo en la figura 3.9a en el rango en que esta es válida. También la utilizaremos

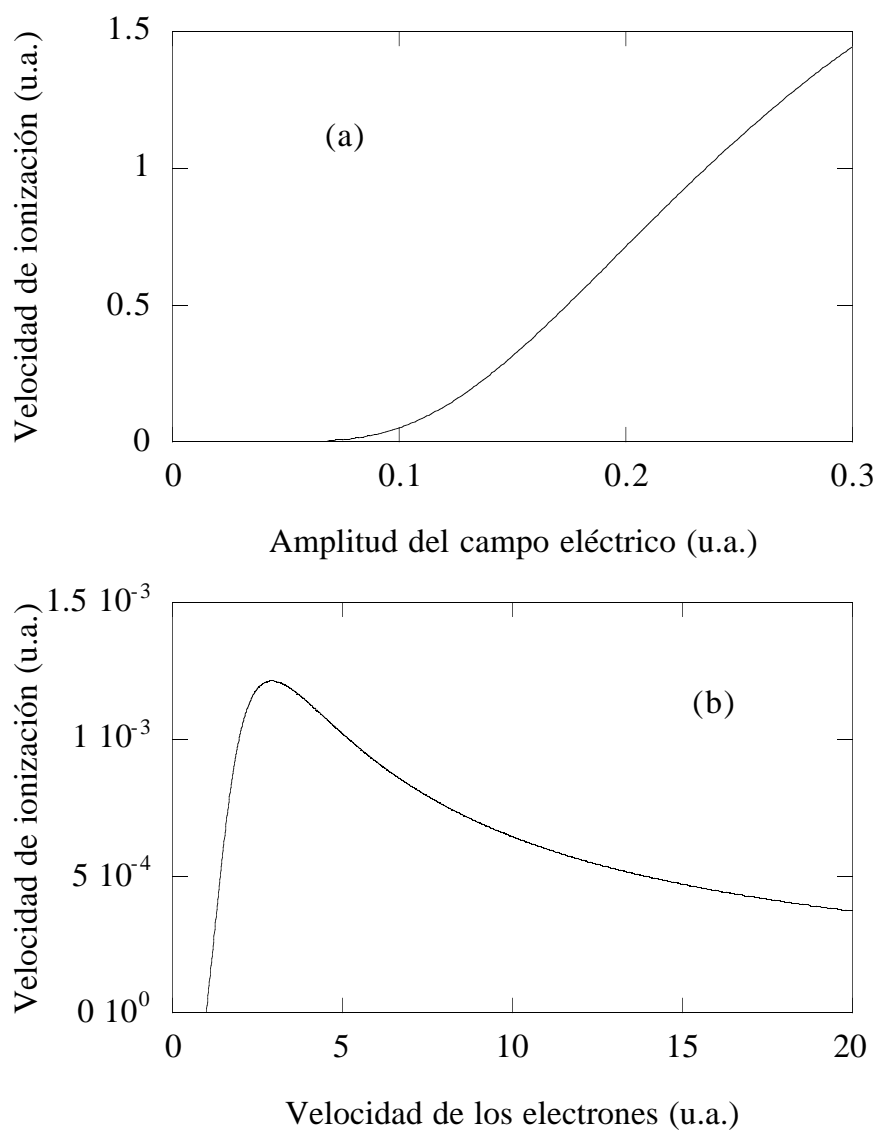


Figura 3.9: Tasa de fotoionización en función de la amplitud del campo eléctrico dada por la ecuación 3.56 (a). Tasa de ionización por colisiones en función de la velocidad del electrón incidente dada por la expresión 3.57 (b).

para campos mayores porque, aunque deja de ser correcta, en esos casos la ionización total se produce mucho antes de que el campo alcance su valor máximo, durante la primera parte del pulso, como ya veremos, y no cometeremos un error importante. En la figura 3.9b podemos ver la tasa de ionización por colisiones electrón-ion en el caso de un medio compuesto de hidrógeno a una densidad igual a la crítica. Observamos cómo incluso cuando la tasa de ionización por colisiones es máxima, para electrones cuya velocidad esté en torno a las tres unidades atómicas, su valor es órdenes de magnitud inferior a la probabilidad de fotoionización cuando la amplitud del campo eléctrico es del orden de 0.1 unidades atómicas. Si la densidad fuera diez veces superior a la crítica, la ionización por colisiones seguiría siendo irrelevante y por ello no la consideraremos. Para más información al respecto nos remitimos a anteriores trabajos en los que ha quedado claro que el efecto de la ionización por colisiones en la propagación de campos electromagnéticos en medios ionizables es menor que el de la fotoionización para iones pequeños, densidades moderadas y campos con intensidades del orden de los que vamos a utilizar [107, 110, 111].

Del mismo modo no vamos a considerar la posibilidad de recombinación por un motivo fundamental: cuando las densidades son altas la pérdida de coherencia debida al desajuste de fase y a las interacciones entre los electrones libres hace que los armónicos altos que hemos estudiado en el caso de átomos aislados, y que también se observan en medios muy poco densos, desaparezcan, es decir, no hay recombinación coherente. Por otro lado, el paso de población, aunque sea de forma incoherente (por colisiones, etc.) desde el continuo a los estados ligados va a ser insignificante para campos suficientemente intensos porque la energía cinética de los electrones será muy alta y los núcleos atómicos no podrán capturarlos. Por idénticas razones despreciamos la contribución a la propagación del campo de la población ligada, que será mucho menos importante que la de los electrones libres,

a menos, quizá, que hubiera alguna resonancia, hecho que supondremos que no se produce. En ausencia de resonancias el efecto de la población ligada puede asimilarse a una permitividad dieléctrica de fondo,  $\varepsilon$ , distinta de la del vacío y la solución de las ecuaciones de propagación es exactamente igual salvo por una renormalización de las variables. Por ello suponemos que el medio es transparente cuando está totalmente desexcitado.

### 3.4 Modelo de cargas fijas para la formación de un plasma por un láser

Vamos ahora a describir un modelo muchísimo más sencillo que nos permitirá estudiar con comodidad los efectos de la ionización en el caso no relativista y poco denso. Este modelo fue introducido por Brunel en 1990 [112] y desde entonces ha sido utilizado con asiduidad, en su forma original o con algún cambio, en trabajos sobre propagación en medios ionizables [107, 110, 113, 114, 115, 116]. De nuevo vamos a considerar únicamente la contribución a la polarización atómica de los electrones libres, negando cualquier efecto del potencial atómico, así como todos los efectos relativistas (lo que sólo es válido para campos poco intensos) y de movimiento de cargas en el medio (lo que sólo es válido para densidades no muy altas). El problema es entonces unidimensional puesto que la geometría sigue siendo la del esquema 3.2 pero sin campo magnético. Supondremos que en el semiplano  $x < 0$  el medio es el vacío y que en el intervalo  $[0, L]$  se extiende un medio ionizable inicialmente transparente. La ecuación de ondas para el campo eléctrico, polarizado en la dirección  $y$ , es entonces muy sencilla

$$\frac{\partial^2 E}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial J}{\partial t}, \quad (3.58)$$

donde la densidad de corriente no es más que

$$J(t) = -N\bar{v} = -\frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^{N(t)} v_i(t). \quad (3.59)$$

Como siempre,  $N$  es la densidad de electrones,  $\bar{v}$  es la velocidad promedio del fluido,  $\mathcal{N}$  es el número de electrones libres en el volumen  $\Delta V$  y  $v_i$  la velocidad del  $i$ -ésimo electrón situado dentro de ese volumen. La corriente en el instante  $t + \Delta t$  vendrá dada por

$$J(t + \Delta t) = -\frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}(t)} v_i(t + \Delta t) - \frac{1}{\Delta V} \sum_{i=\mathcal{N}(t)+1}^{\mathcal{N}(t+\Delta t)} v_i(t + \Delta t). \quad (3.60)$$

El segundo de los dos sumandos en el lado derecho de (3.60) representa los electrones que se han ionizado en el intervalo  $[t, t + \Delta t]$ , puesto que negamos el movimiento de los electrones de una celda a otra (de ahí que llamemos a este modelo de cargas fijas). Si nos ceñimos al régimen de ionización por túnel sabemos que podemos aproximar la velocidad de los electrones ionizados a cero, con lo cual ese segundo sumando es nulo. Por tanto, restando (3.59) de (3.60), dividiendo por  $\Delta t$  y pasando al límite tenemos que la evolución de la densidad de corriente viene dada por

$$\frac{\partial J}{\partial t} = -\frac{1}{\Delta V} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}(t)} \frac{dv_i}{dt}. \quad (3.61)$$

Como todos los electrones de la celda tienen la misma ecuación de movimiento  $\dot{v}_i = -E$ , la ecuación de evolución para  $J$  será entonces

$$\frac{\partial J}{\partial t} = NE = \frac{\omega_{p0}^2}{4\pi} nE, \quad (3.62)$$

siendo  $\omega_{p0} = \sqrt{4\pi N_0}$  la frecuencia de plasma máxima alcanzada cuando toda la población está ionizada y  $n = N/N_0$  la densidad de electrones libres normalizada o grado de ionización, cuya evolución vendrá dada por la ecuación

$$\frac{\partial n}{\partial t} = W(1 - n), \quad (3.63)$$

donde  $W(x, t)$  es la tasa de ionización, dada por la ecuación (3.56). Hemos hecho uso de que en este caso, al no haber movimiento de cargas, la población ligada es  $N_b = N_0 - N$ . Las tres ecuaciones (3.58), (3.62) y (3.63) nos dan la evolución

completa de nuestro modelo, en el que sólo está incluido el efecto de la ionización en la propagación del campo, que podemos separar así de todos los otros efectos existentes en un plasma real y que sí están incluidos, con mayor o menor exactitud, en los códigos de partículas.

Si escribimos (3.58) en su forma integral

$$E(x, t) = E_i(x, t) - \frac{2\pi}{c} \int_0^L dx' J\left(x', t - \frac{|x - x'|}{c}\right), \quad (3.64)$$

donde  $E_i(x, t)$  es el campo incidente, vemos más claramente que el campo total es la suma del incidente más el de reacción inducido por  $J$  y el campo reflejado será sencillamente  $E_r(t) = E(0, t) - E_i(0, t)$ . La resolución numérica de las ecuaciones (3.62) y (3.63) la hacemos mediante el método de Runge-Kutta de cuarto orden y la de (3.64) descomponiendo la integral en una parte que se propague hacia la izquierda y otra hacia la derecha, tal y como se ha explicado en la sección 3.2. De este modo se reduce el tamaño necesario de la malla espacial, acelerándose de forma considerable los cálculos.

# Capítulo 4

## Propagación de armónicos en plasmas generados por un láser

Una vez conocidas todas nuestras herramientas teóricas y numéricas vamos a estudiar cómo se generan y propagan los armónicos durante la ionización de un medio denso por un pulso láser intenso. Comenzaremos hablando de la generación de los armónicos y pasaremos más adelante a comentar algunos efectos de propagación.

### 4.1 Generación de armónicos por ionización inhomogénea [114, 115]

Para estudiar si pueden generarse armónicos durante la propagación de un pulso láser en un medio ionizable retomemos el modelo simplificado descrito en la sección 3.4. Si el campo incidente tiene una forma  $E_i(x, t) = 2F_i(x, t) \cos(\omega_0 t - k_0 x)$ , con la envolvente  $F_i(x, t)$  lentamente variable en el tiempo y el espacio, podemos buscar soluciones a las ecuaciones (3.62), (3.63) y (3.64) en forma de desarrollo de Floquet

$$E(x, t) = \sum_{q=-\infty}^{\infty} E_{2q+1}(x, t) \exp[-i(2q+1)\omega_0 t], \quad (4.1)$$

$$J(x, t) = \sum_{q=-\infty}^{\infty} j_{2q+1}(x, t) \exp[-i(2q+1)\omega_0 t], \quad (4.2)$$

$$n(x, t) = \sum_{q=-\infty}^{\infty} n_{2q}(x, t) \exp[-i2q\omega_0 t], \quad (4.3)$$

$$W(x, t) = \sum_{q=-\infty}^{\infty} w_{2q}(x, t) \exp[-i2q\omega_0 t]. \quad (4.4)$$

La tasa de ionización  $W$  tiene únicamente componentes pares puesto que depende del módulo del campo, lo mismo que  $N$ . Por el contrario  $E$  y  $J$  tienen únicamente componentes impares. Suponemos que todas las amplitudes de los armónicos varían lentamente en el tiempo, pero no en el espacio puesto que para densidades altas puede haber una considerable reflexión. Sustituyendo estos desarrollos en las ecuaciones (3.62)- (3.64) y asumiendo que: (a) la tasa de ionización es mucho menor que la frecuencia del láser, es decir, que durante un ciclo óptico sólo se ioniza una pequeña parte de la población electrónica; (b) debido a esto los posibles armónicos serán débiles y podemos desprestigiar su efecto sobre el fundamental que (c) es la única fuente de los demás (ignoramos los acoplamientos entre armónicos altos). Todas estas condiciones se resumen en que el campo sea poco intenso para que la ionización sea muy lenta y el medio poco denso para que los acoplamientos sean débiles. Suponiendo esto cierto llegamos al siguiente sistema de ecuaciones [115]

$$E_1(x, t) = E_i(x, t) \exp(ik_0 x) - \frac{1}{2} ik_0 \left( \frac{\omega_{p0}}{\omega_0} \right)^2 \int_0^\infty dx' \exp(ik_0 |x - x'|) n_0 E_1(x', \tau), \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial n_0}{\partial t} = w_0(1 - n_0), \quad (4.6)$$

$$E_{2q+1}(x, t) = \frac{1}{2} ik_{2q+1} \left( \frac{\omega_{p0}}{\omega_{2q+1}} \right)^2 \int_0^\infty dx' \exp(ik_0 |x - x'|) \times \left[ \frac{w_{2q}}{\omega_{2q}} E_1(x', \tau) + \frac{w_{2(q+1)}}{\omega_{2(q+1)}} E_{-1}(x', \tau) \right], \quad (4.7)$$

donde  $\tau = t - |x - x'|/c$ ,  $k_r = rk_0$ ,  $\omega_r = r\omega_0$  y  $E_{-1} = E_1^*$ . Sin más que observar la ecuación (4.7) nos damos cuenta de que habrá generación de armónicos siempre que la tasa de ionización tenga componentes de Fourier altas, es decir, siempre que tenga una dependencia rápida con el tiempo. Este es el caso de la expresión



que usamos en el régimen de túnel, tal y como vimos en el capítulo 2. Además, durante la propagación el campo no será uniforme en todo el medio, por lo que  $W$  también variará apreciablemente en el espacio. Esta inhomogeneidad hace que los armónicos se generen únicamente en los lugares donde se va produciendo la ionización. La ecuación (4.7) puede resolverse de forma aproximada cuando la densidad del medio es muy baja y apenas hay reflexión, siendo posible entonces hacer un desarrollo de Floquet también en la coordenada  $x$  [112]. No vamos a hacerlo aquí puesto que la aproximación de la envolvente lentamente variable falla para describir la propagación en el medio en los casos que más nos interesan, cuando las densidades son próximas a la crítica y la reflexión apreciable, debido a efectos de desajuste de fase y dispersión [115]. El hecho es que una vez más la dependencia temporal de la tasa de ionización es un mecanismo eficiente en la generación de armónicos.

Inicialmente se pensó en que los armónicos podrían ser visibles durante la transmisión de un pulso a lo largo de un gas poco denso [112, 113] y fueron observados experimentalmente haciendo incidir un láser de  $\text{CO}_2$  sobre gases nobles [117]. Sin embargo, ya sabemos que durante la propagación se produce un desajuste de fase que hace que se pierda por completo la visibilidad de los armónicos al cabo de una distancia muy corta, especialmente cuando hay electrones libres. Nosotros hemos propuesto utilizar medios más densos, con densidades iguales o superiores a la crítica, en los que los armónicos se generen por el mismo procedimiento pero se reflejen en lugar de transmitirse [114, 115]. La ventaja de los armónicos reflejados es que se propagarán prácticamente en el vacío y los efectos de desajuste de fase serán mínimos.

En la figura 4.1a podemos observar el campo reflejado y la ionización en la frontera cuando incidimos con un pulso de amplitud máxima  $E_0 = 0.08$  u.a., duración 15 ciclos y frecuencia  $\omega_0 = 0.05$  u.a. (que será la que usemos a partir de

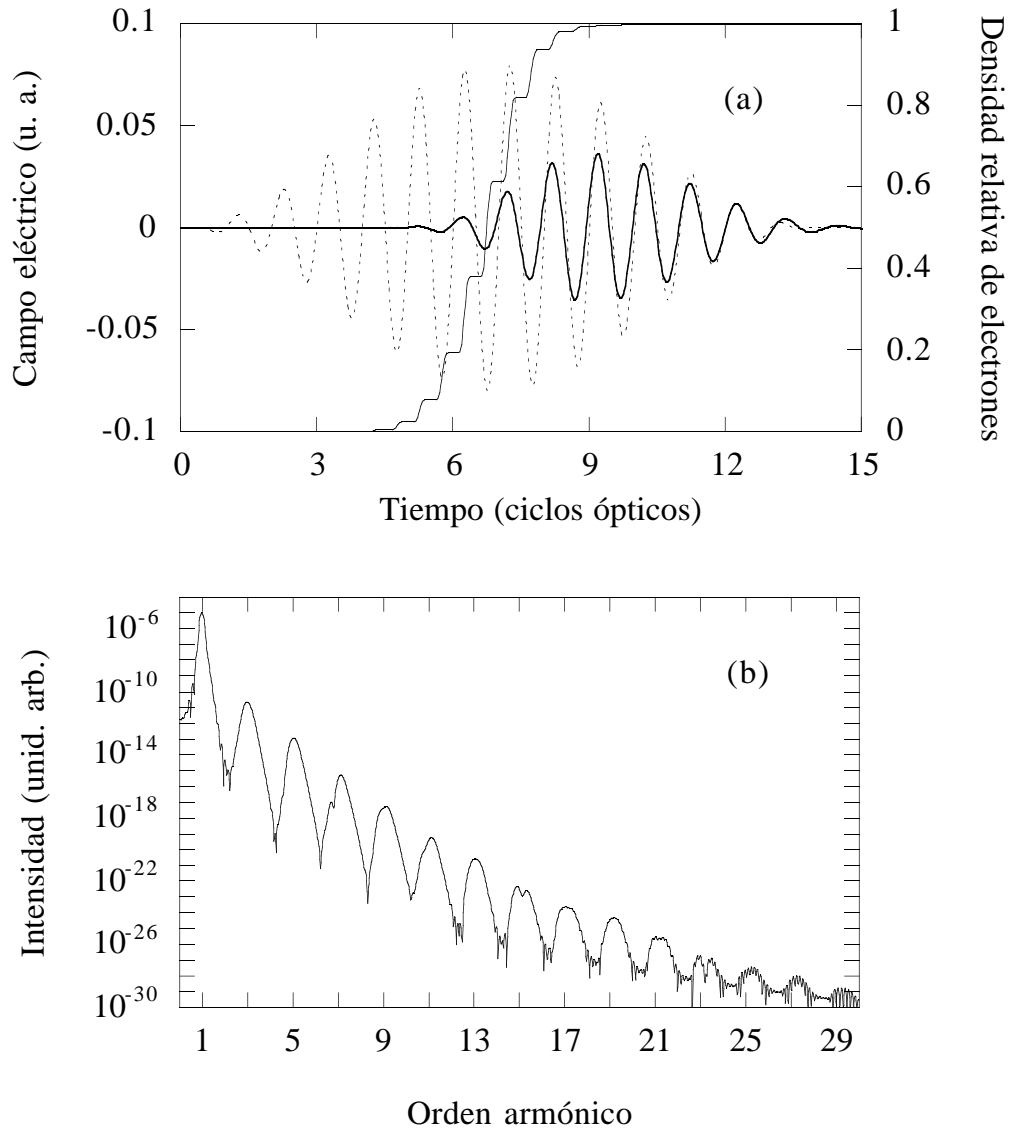


Figura 4.1: (a) Campo reflejado (línea continua gruesa) al incidir un pulso de frecuencia  $\omega_0 = 0.05$  u.a., longitud 15 ciclos ópticos y amplitud máxima  $E_0 = 0.08$  u.a. sobre un medio ionizable cuya densidad es igual a la crítica en condiciones de ionización total y cuyo espesor es  $20\lambda_0$ . En línea de trazos hemos representado el campo incidente y en línea continua fina la densidad de electrones libres en la frontera. (b) Espectro correspondiente al campo reflejado de (a).

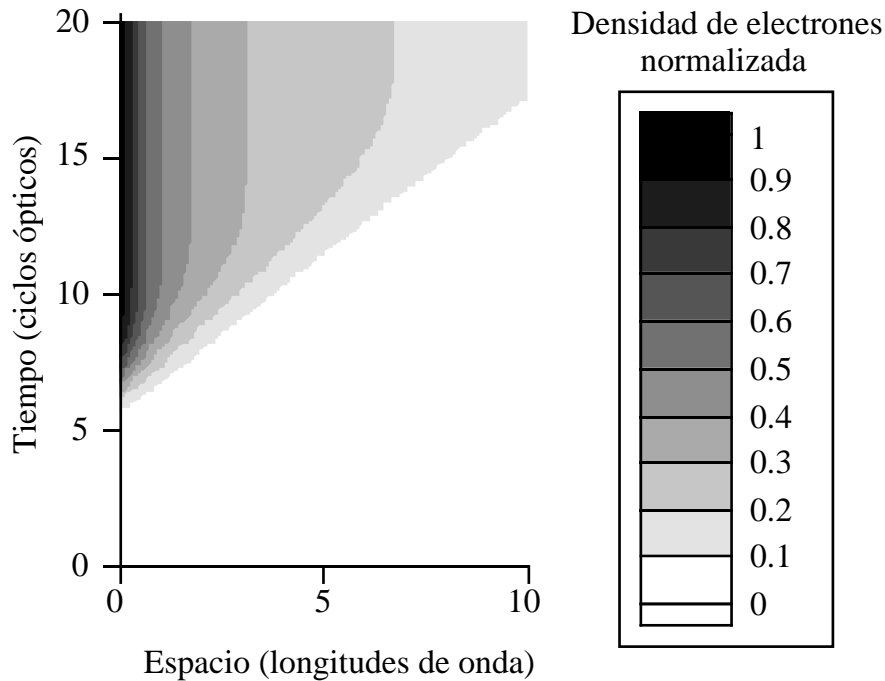


Figura 4.2: Evolución espaciotemporal de la densidad de electrones libres en el medio para el caso de la figura 4.1.

ahora salvo que se indique lo contrario) sobre una lámina de densidad  $N_0 = N_c$  cuando está totalmente ionizada y de espesor  $20\lambda_0$ . Vemos que no hay reflexión hasta que el máximo del pulso incidente no llega a la superficie frontera, momento en el cual la amplitud del campo es suficiente para ionizar el medio, que pasa de ser transparente a tener, al menos en la zona próxima a la frontera, una densidad de plasma igual a la crítica. Por ello el pulso reflejado es menos intenso y más corto que el incidente. Comprobamos también lo que anticipábamos antes: la ionización se produce mayormente cuando el campo eléctrico está cerca de sus extremos y por ello el perfil de la densidad de electrones libres aumenta escalonadamente. Debido a ello aparecen los armónicos en el campo reflejado que podemos observar en la figura 4.1b. Los armónicos no son muy intensos en comparación con el fundamental pero sí son perfectamente visibles hasta órdenes relativamente altos. Podemos ver algunas características generales como son la anchura de los picos y el corrimiento

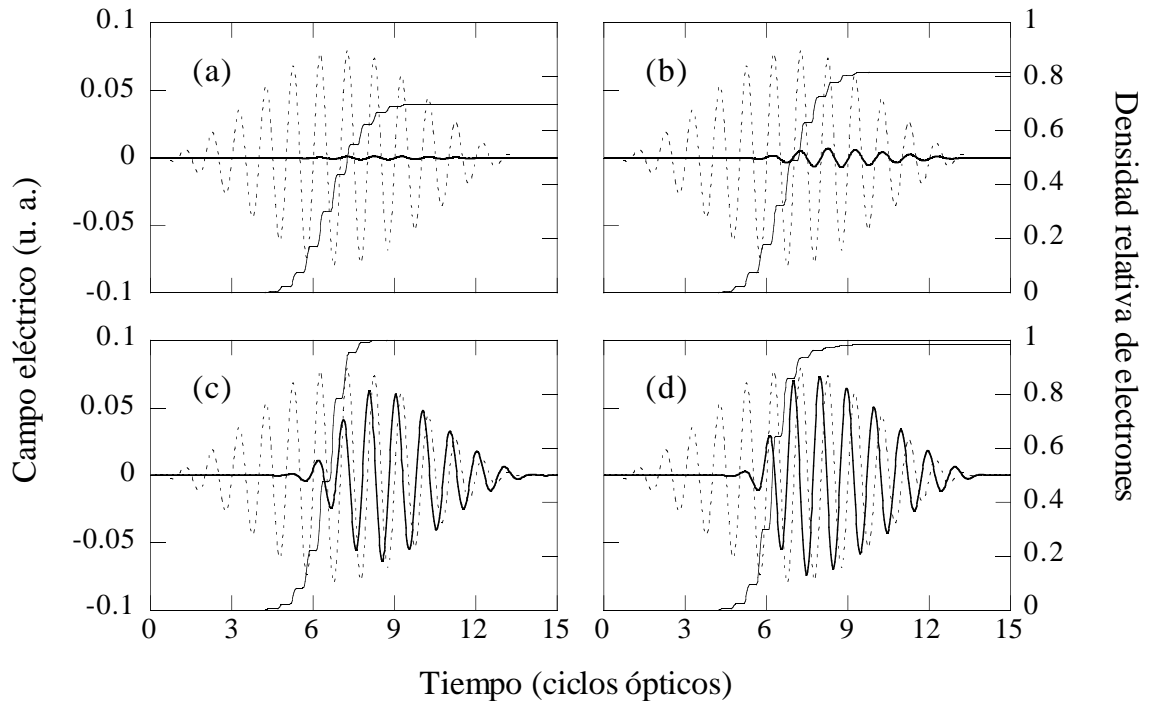


Figura 4.3: Lo mismo que la figura 4.1a para valores de la densidad máxima  $0.1N_c$  (a),  $0.4N_c$  (b),  $2N_c$  (c) y  $5N_c$  (d).

hacia frecuencias más altas, que más tarde analizaremos. En la figura 4.2 podemos ver la evolución espaciotemporal de la densidad de electrones libres. Se observa cómo va propagándose el frente de ionización y cómo decrece en el espacio también escalonadamente la densidad de plasma final debido a la absorción del campo en el medio. De todos modos, vamos a centrarnos ahora en el campo reflejado y a dejar los efectos de propagación para más adelante.

Para que el pulso reflejado en la frontera tenga una intensidad razonable la densidad del medio debe ser cercana a la crítica, pues si es mucho menor la reflexión será muy baja. En la figura 4.3 podemos ver los pulsos reflejados y los perfiles de densidad para cuatro valores de la densidad máxima distintos del crítico y en la figura 4.4 los correspondientes espectros. Cuando  $N_0 = 0.1N_c$  (a) casi no hay

reflexión y ni siquiera hay ionización total en la frontera. Los armónicos reflejados son muy débiles. Al aumentar la densidad hasta  $N_0 = 0.4N_c$  (b) tenemos un campo reflejado algo mayor, aunque sigue sin estar totalmente ionizada la frontera. Los armónicos también aumentan en número e intensidad. Para valores supercríticos,  $N_0 = 2N_c$  (c) y  $N_0 = 5N_c$  (d) la reflexión crece notablemente y la amplitud máxima del pulso reflejado es casi la misma que la del incidente, pero como ya dijimos es más corto y cada vez más asimétrico. Este efecto podría ser utilizado para obtener pulsos con un perfil de subida rápido. En cuanto a los armónicos, son más intensos que en los casos subcríticos pero su calidad es mucho menor debido a efectos de desajuste de fase provocados por la ionización tan rápida y la alta densidad de electrones libres cerca de la frontera. A la vista de las figuras 4.1b y 4.4 podemos decir que la mejor situación para que este tipo de armónicos sean visibles es una densidad igual o ligeramente inferior a la crítica.

En cuanto al efecto de la intensidad del pulso incidente, es similar al de la densidad del medio. En la figura 4.5 podemos ver los campos reflejados, densidades en la frontera y espectros para amplitudes máximas del pulso incidente  $E_0 = 0.06$  y  $E_0 = 0.1$  u.a. cuando la densidad máxima del medio es igual a la crítica. En el caso del campo menos intenso, la ionización es lógicamente más baja y en consecuencia el campo reflejado es más pequeño y su espectro tiene pocos armónicos, pero son bien visibles. El resultado es muy parecido al que obteníamos con un campo  $E_0 = 0.08$  u.a. y una densidad  $N_0 = 0.1N_c$ . Por el contrario, para un campo de amplitud  $E_0 = 0.1$  u.a. la ionización es más rápida, comenzando antes de que el máximo del pulso incidente llegue a la frontera. Por ello el pulso reflejado es más largo e intenso. Del mismo modo los armónicos tienen mayor intensidad pero son muy anchos. Es como si la densidad del medio fuera mayor y el campo menor.

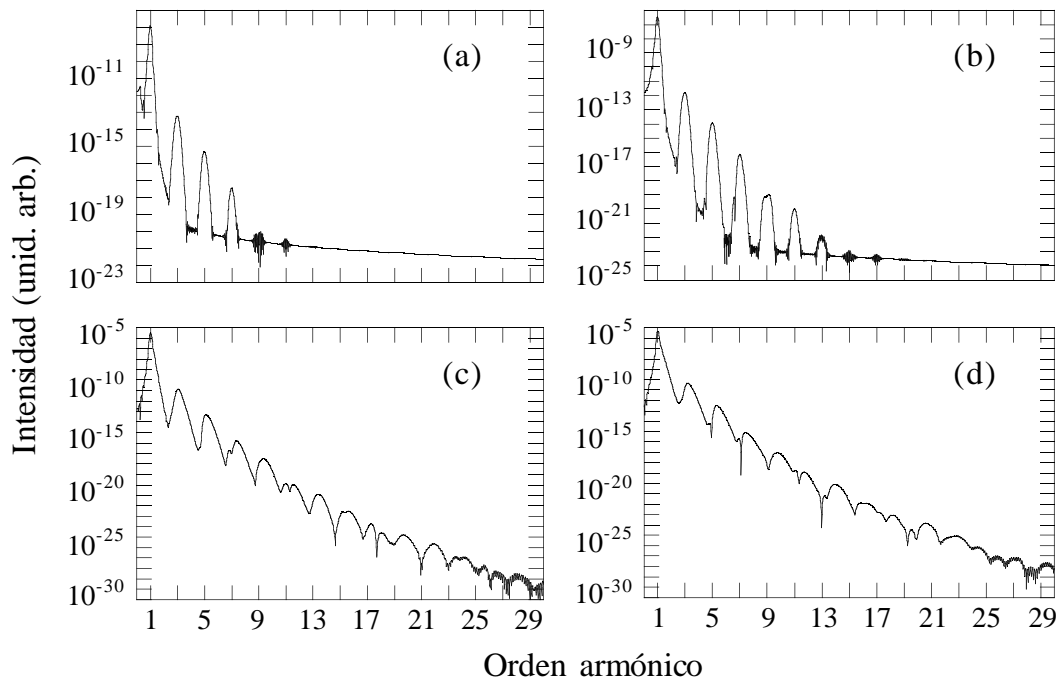


Figura 4.4: Espectros correspondientes a los campos reflejados de la figura 4.3.

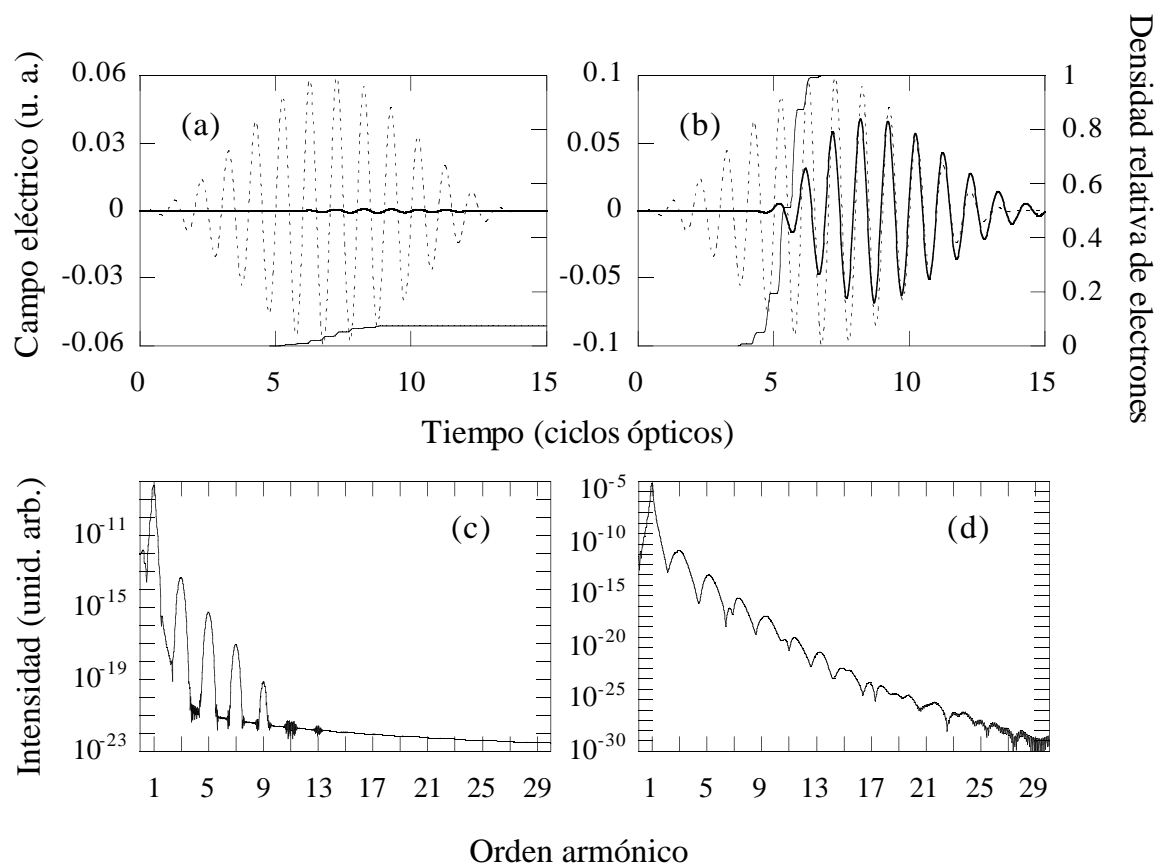


Figura 4.5: Campos reflejados y densidades de electrones libres en las fronteras en el caso de una lámina de densidad máxima igual a la crítica para pulsos con amplitudes máximas  $E_0 = 0.06$  (a) y  $0.1$  (b) u.a. (c) y (d) muestran los espectros correspondientes.

## 4.2 Efecto de la ionización en el caso de campos intensos [118]

Hasta ahora hemos utilizado el modelo de cargas fijas para explicar la generación de armónicos debida a la ionización dependiente de tiempo y espacio. Sin embargo, pudiera ser que un modelo tan simple, que trata los electrones libres como un fluido sin interacciones y por tanto no incluye ningún efecto colectivo, ofreciera unos resultados poco creíbles. Vamos a comprobar ahora la validez de este modelo comparándolo con los resultados obtenidos en las simulaciones de partícula en celda [118].

Es de suponer que para medios muy sobredensos el modelo de cargas fijas falla de forma clara porque en ese caso los efectos colectivos son los más relevantes, así que vamos a ocuparnos del caso de medios ligeramente sobredensos, que es también el más interesante en la generación de armónicos, tanto por ionización como por los efectos relativistas. Además vamos a utilizar ahora láminas muy finas porque los armónicos se generan en un espacio corto y aumentar el espesor de la diana nos lleva únicamente a alargar los ya de por sí costosos cálculos. De todas formas veremos más adelante los efectos en la propagación del campo de medios más gruesos cuando la densidad y el campo no son muy altos.

Consideremos fijos los parámetros propios de la lámina, cuyo espesor será  $0.1\lambda_0$  y su densidad en el caso de ionización total  $N_0 = 1.69N_c$  ( $\omega_{p0} = 1.3\omega_0$ ). El pulso incidente tendrá una duración de veinte ciclos y su amplitud máxima tomará tres valores:  $E_0 = 0.1, 0.4$  y  $4$  u.a. En la figura 4.6 mostramos los pulsos reflejados para las tres intensidades del campo incidente obtenidos con los dos modelos, el PIC y el de cargas fijas. Puede verse cómo el resultado es casi idéntico en el caso del campo más débil y en los otros dos aparecen ligeras diferencias. Podríamos concluir que el modelo sencillo funciona muy bien para campos pequeños y bastante bien incluso con campos de amplitud grande... y estaríamos equivocados, o, mejor



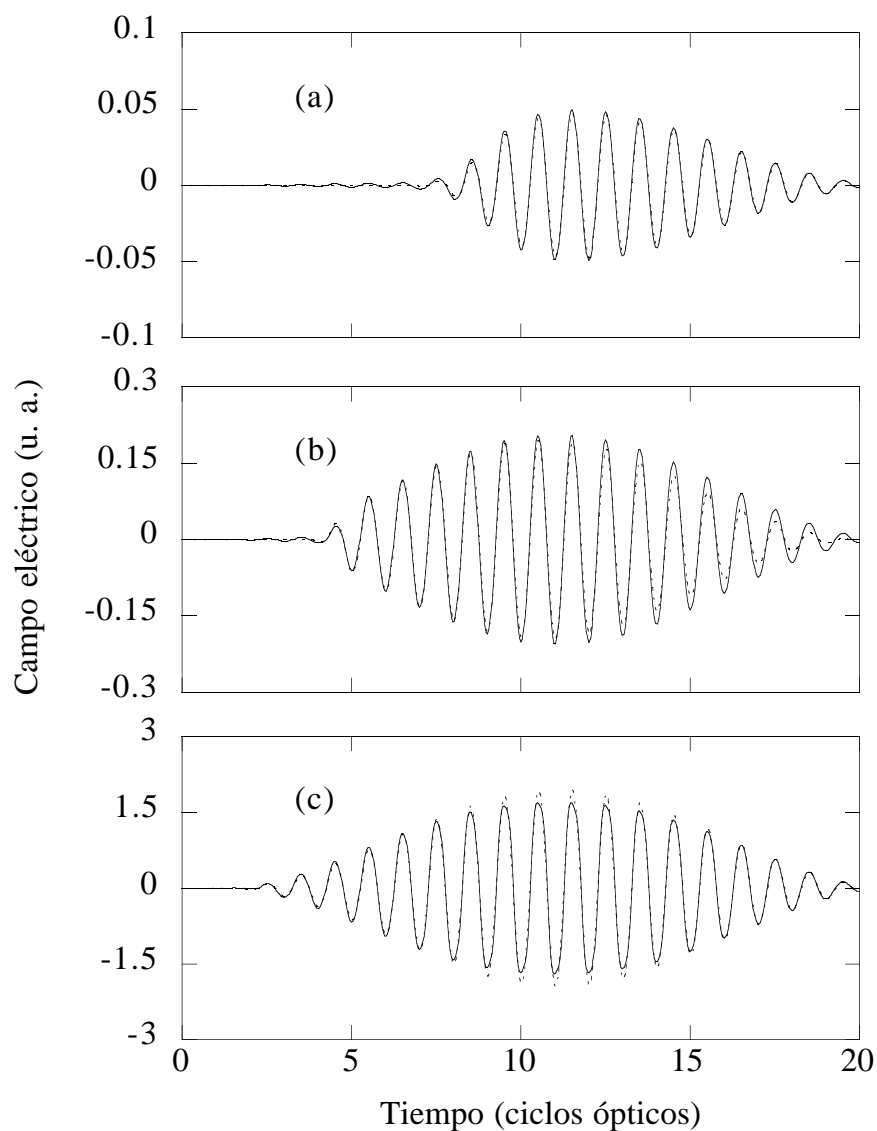


Figura 4.6: Campos reflejados en una lámina de espesor  $0.1 \lambda_0$  y densidad  $N_0 = 1.69 N_c$  cuando incidimos sobre ella con un pulso de veinte ciclos de duración y amplitud máxima  $E_0 = 0.1$  (a),  $0.4$  (b) y  $4$  (c) u.a. La línea continua representa los resultados obtenidos con un cálculo de tipo PIC y la de trazos los del modelo de cargas fijas.

dicho, depende de qué es lo que le pidamos. A nosotros nos interesan los armónicos, así que hemos hallado el espectro de estos campos reflejados, que mostramos en las figuras 4.7, 4.8 y 4.9. En todas ellas comparamos los resultados obtenidos con el cálculo de partículas (a), con el modelo sencillo (b) y con el cálculo de partículas considerando que no hay ionización sino que la lámina está totalmente ionizada antes de la interacción con el láser (c).

Para el campo de 0.1 u.a. (figura 4.7) puede verse que los armónicos obtenidos con los dos tipos de modelos son casi idénticos, con la diferencia de que en el cálculo PIC son menos visibles, debido al efecto de las interacciones entre partículas que provoca un aumento de ruido. Por lo demás la intensidad y la forma de los armónicos visibles es exactamente la misma. Por el contrario, cuando la lámina está preionizada el resultado es bien distinto, apareciendo sólo un tímido apunte de tercer armónico tres órdenes de magnitud menos intenso que cuando hay ionización. Podemos decir ya con seguridad que en este caso la radiación procedente del plasma está controlada por el proceso de ionización y que el modelo de cargas fijas reproduce bien los resultados del más complejo cálculo PIC. En este caso la aproximación habitual en los cálculos PIC de considerar que la lámina está completamente ionizada antes de la interacción con el láser es absolutamente errónea.

Cuando la amplitud del campo incidente crece hasta 0.4 u.a. (figura 4.8) los resultados comienzan a cambiar. Todavía son visibles los armónicos fruto de la ionización, pero hay una diferencia de casi un orden de magnitud en la intensidad del tercer armónico entre el cálculo PIC (a) y el modelo sencillo (b). Esa intensidad coincide además con la que obtenemos en el caso de la lámina preionizada (c), aunque en este caso el pico es mucho más nítido debido a la ausencia de los efectos de desajuste de fase de la ionización. En esta situación podemos decir que necesitamos incluir la ionización para describir correctamente la radiación generada por

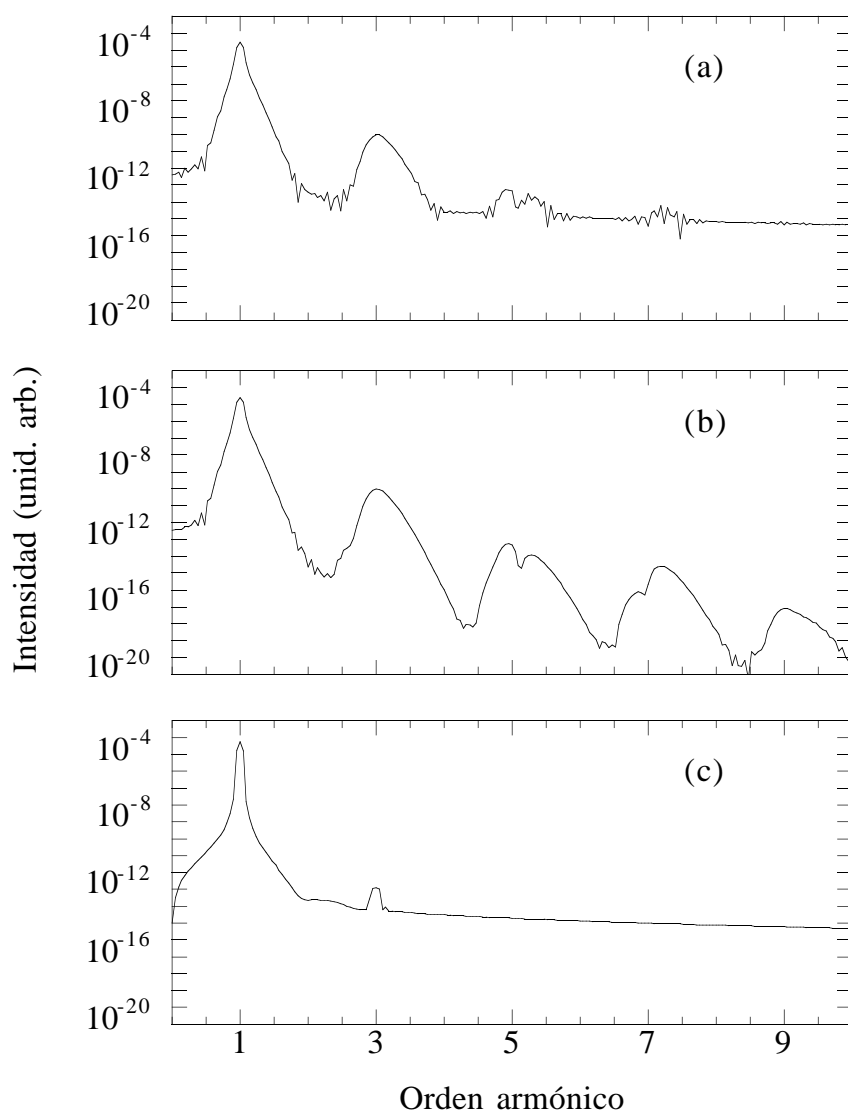


Figura 4.7: Espectros correspondientes al caso de la figura 4.6(a) obtenidos con un cálculo PIC (a), el modelo sencillo (b) y un cálculo PIC suponiendo la lámina preionizada.

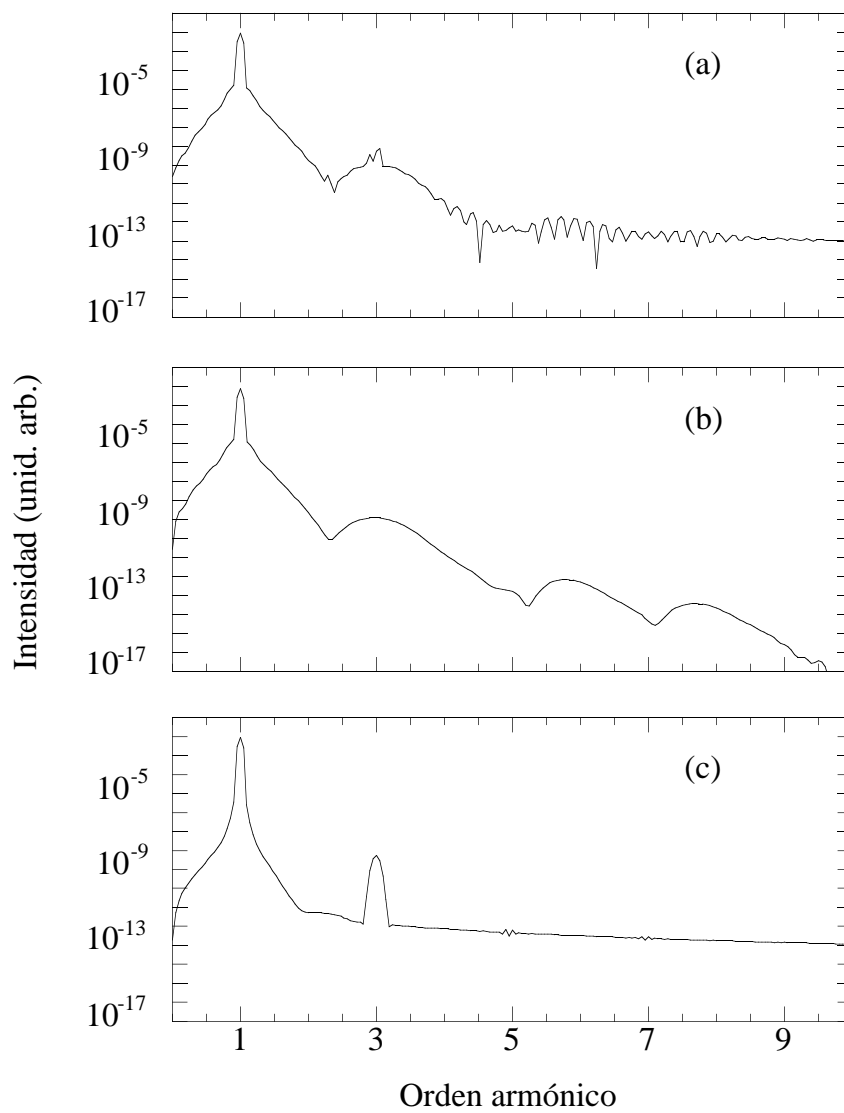


Figura 4.8: Lo mismo que la figura 4.7 para un campo de amplitud 0.4 u.a.

el medio pero los efectos colectivos comienzan a jugar el papel más importante.

Por último, cuando nos vamos a una amplitud de 4 u.a. (figura 4.9) los espectros obtenidos con la lámina no ionizada (a) y preionizada (c) son casi iguales, mientras que el resultado del modelo sencillo (b) es totalmente distinto, siendo por tanto dicho modelo poco apto para describir la interacción para campos tan intensos. En este caso la ionización es muy poco importante y podríamos obviar su contribución, como se ha hecho en trabajos anteriores [84, 85].

La naturaleza de los armónicos generados en los dos casos límites es muy distinta, como ya sabemos. Para que quede aún más claro, hemos representado en la figura 4.10 la evolución espaciotemporal de la densidad de electrones libres en ambos casos. Para el campo más pequeño los armónicos se generan durante la etapa de ionización, tal y como hemos explicado. Puede verse cómo la ionización va progresando a saltos en el medio cuando el pulso se acerca a su máximo. Cuando la ionización es completa el único mecanismo de generación de armónicos es el de la fuerza magnética relativista, que para este campo tan débil es casi inapreciable. Sin embargo, para el pulso de  $E_0 = 4$  u.a. la ionización es muy rápida, ocurriendo de forma prácticamente instantánea en todo el material al cabo del primer ciclo del campo (cuando su valor es mucho menor que el del máximo y por tanto podemos usar la fórmula de túnel para la tasa de ionización) y en cuanto se ha producido los electrones comienzan a oscilar como un *espejo móvil*. La inhomogeneidad de la densidad de electrones en el medio es también mucho mayor.

El peso de cada mecanismo (ionización y campo magnético) en la generación de armónicos total está relacionado con el tiempo que requiere el medio para ionizarse completamente y, por tanto, con la intensidad del láser. Cuando este tiempo es comparable a la duración total del pulso los armónicos serán generados principalmente por la ionización y tendrán esa forma ensanchada característica. Por contra, cuando ese tiempo sea muy corto el espectro tendrá picos más agudos generados

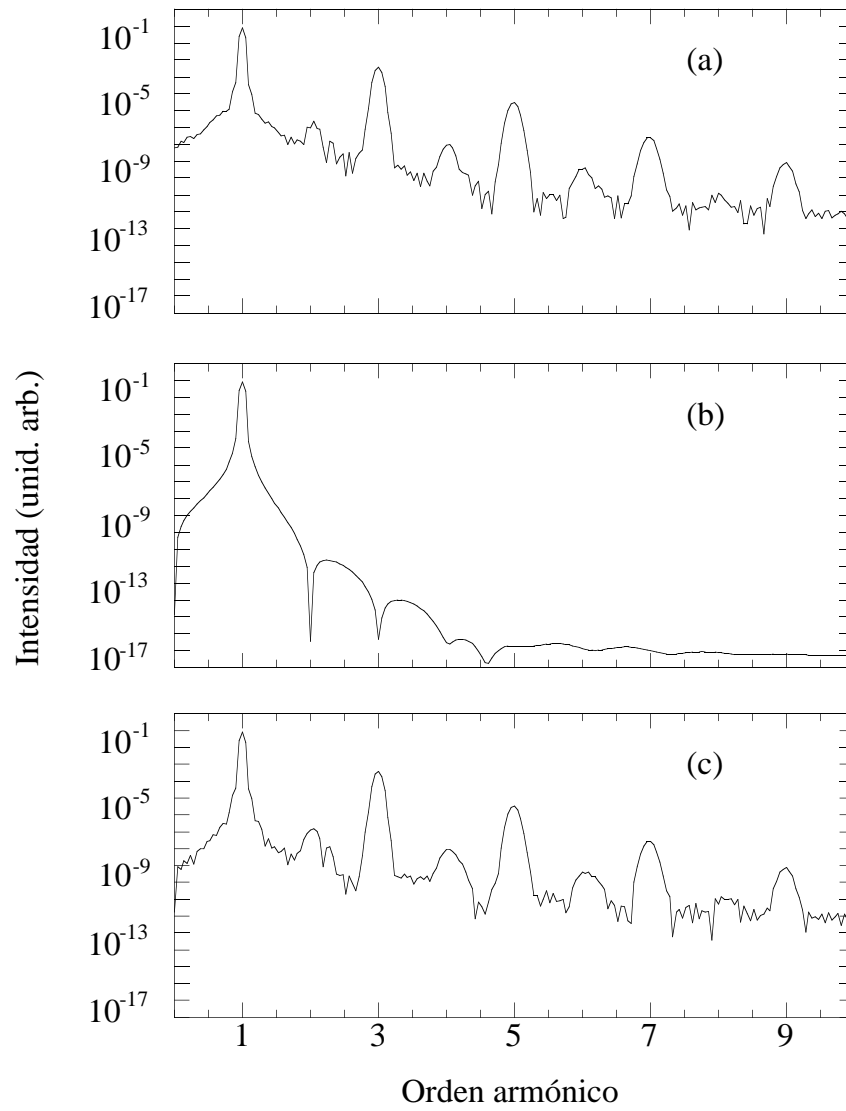


Figura 4.9: Lo mismo que la figura 4.7 para un campo de amplitud 4 u.a.

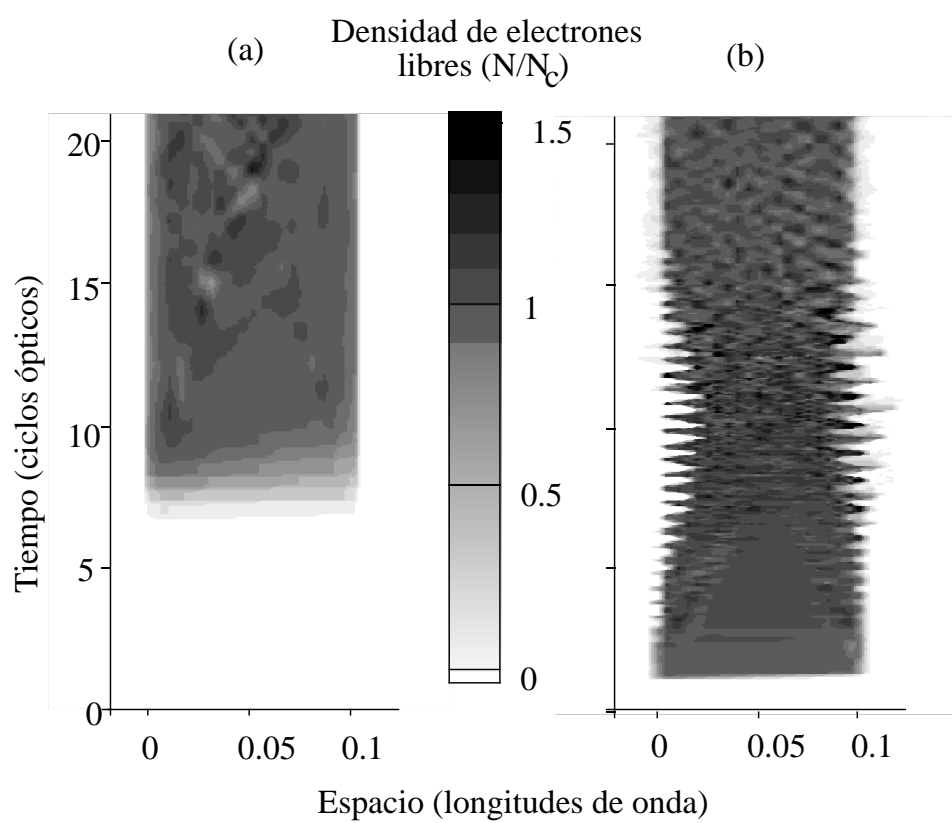


Figura 4.10: Evolución de la densidad de electrones libres cuando el campo incidente tiene una amplitud de 0.1 (a) y 4 (b) u.a.

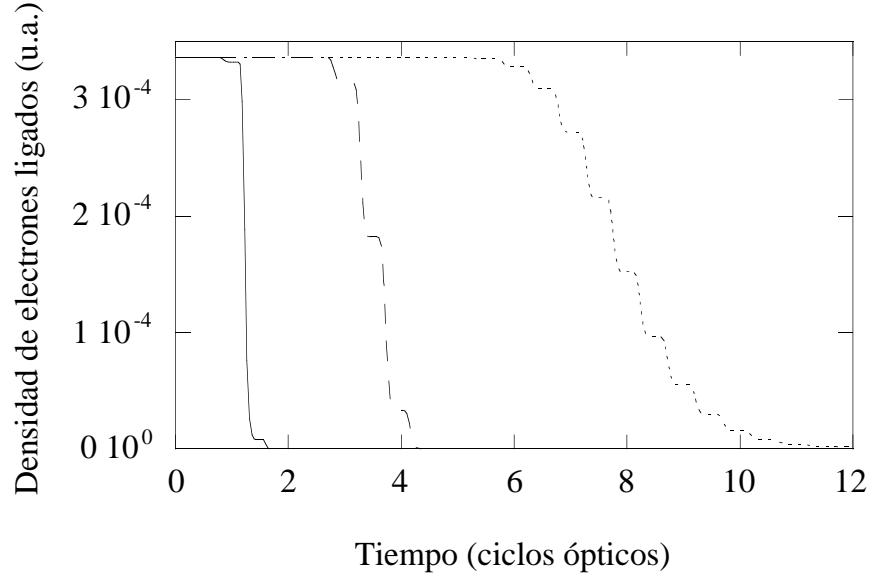


Figura 4.11: Evolución de la densidad de electrones ligados en el centro de la lámina para amplitudes incidentes 0.1 (línea de puntos), 0.4 (línea de trazos) y 4 (línea continua) u.a.

por la fuerza magnética. En la figura 4.11 hemos representado la evolución de la población de electrones ligados en el centro de la lámina para las tres amplitudes del pulso incidente. Podemos ver que en el caso más intenso ( $E_0 = 4$  u.a.) la ionización se lleva a cabo en menos de un ciclo, tal y como veíamos antes, y por ello no hay armónicos debidos a la ionización; en el más débil ( $E_0 = 0.1$  u.a.) el tiempo de ionización es de unos cuatro ciclos, suficiente para generar armónicos; en el caso intermedio ( $E_0 = 0.4$  u.a.) el tiempo de ionización es de dos ciclos. Resulta patente que para tener armónicos debidos a la ionización, ésta debe durar más de un ciclo. Del mismo modo, para que existan los otros armónicos, los debidos a la fuerza  $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ , hace falta que un campo suficientemente intenso actúe sobre los electrones durante varios ciclos.

La importancia relativa de los dos regímenes dependerá de la parte del tiempo de interacción durante la que sean efectivos. Para incidir más en esto, en la figura



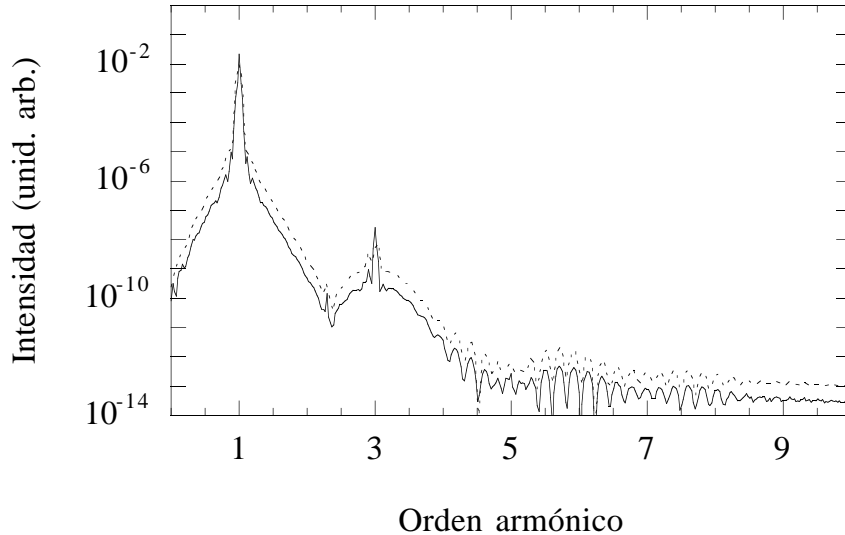


Figura 4.12: Espectro del campo reflejado cuando incidimos en la lámina con un pulso de amplitud máxima  $E_0 = 0.4$  u.a. y duración 40 ciclos, diez de ellos de subida veinte de amplitud constante y diez de bajada (línea continua). En línea de puntos representamos el resultado de la figura 4.8 en la que el pulso tenía veinte ciclos, sin parte de amplitud constante en el centro.

4.12 se ha representado el espectro obtenido para el campo intermedio para un pulso de 40 ciclos con la misma envolvente en su primera parte que en el caso de la figura 4.8, es decir, diez ciclos de crecimiento en forma de seno cuadrado, veinte de amplitud constante y otros diez de decrecimiento en forma de seno cuadrado. El hecho de que la primera parte del pulso sea idéntica nos asegura que el proceso de ionización en ambos casos es igual, mientras que el añadido de esos veinte ciclos a máxima intensidad aumenta el intervalo en el que el medio totalmente ionizado genera armónicos. Podemos ver que hay un incremento en la altura del pico correspondiente al tercer armónico y una pequeña reducción de los picos anchos debidos a la ionización, lo que confirma nuestra anterior aseveración.

Podemos concluir que hay dos diferentes regímenes de ionización con relación a la generación de armónicos, cuya importancia depende de la relación entre el

tiempo de ionización y la duración total del pulso. En el caso de campos poco intensos el tiempo de ionización es de varios ciclos ópticos y los armónicos se generan precisamente por esa ionización dependiente de tiempo y espacio. Para estos valores el modelo de cargas fijas de Brunel es suficiente para explicar los resultados. Cuando el campo es más intenso el tiempo de ionización se reduce y se observan armónicos más intensos debidos a la componente magnética de la fuerza que actúa sobre los electrones. El papel de la ionización es entonces despreciable y podemos suponer que el plasma está preionizado antes de la interacción con la parte importante del pulso, que es la cercana al máximo.

## 4.3 Efectos de propagación

Vamos ahora a comentar algunos de los tantas veces pospuestos efectos de propagación. Vamos a centrarnos concretamente en dos efectos cromáticos como son el desplazamiento al azul y el filtro de frecuencias bajas, y, más brevemente, en los efectos de desajuste de fase en el caso de medios con densidades de electrones altas.

### 4.3.1 Variaciones de longitud de onda. Corrimiento al azul

En los espectros de armónicos debidos a la ionización que hemos mostrado hasta ahora hay una característica que se repite: los picos son asimétricos y tienen una falda que tiende hacia las frecuencias altas. Incluso es perceptible en algunos casos que la posición del máximo no coincide con el múltiplo entero de la frecuencia incidente sino que es mayor. Este efecto se conoce como corrimiento al azul (*blueshift* en inglés) y es consecuencia directa de la ionización. Expliquemos de la forma más sencilla posible este desplazamiento de frecuencia [119, 120].

Según el campo va propagándose en el medio, éste se va ionizando, lo que hace

variar su índice de refracción  $\eta$  (no utilizamos la notación más común  $n$  para que no se produzca confusión con la densidad de electrones normalizada). Esto produce un cambio de fase durante la propagación a lo largo de un intervalo  $\delta x$  dado por  $\phi = k\delta x = k_0\eta\delta x$ . El cambio de frecuencia será simplemente  $\delta\omega = -d\phi/dt = -k_0\partial\eta/\partial t \delta x$ . El salto de frecuencia total que sufre el campo al propagarse entre 0 y  $L$  será

$$\Delta\omega = -\frac{\omega_0}{c} \int_0^L dx \frac{\partial\eta(x,t)}{\partial t}. \quad (4.8)$$

Esta ecuación sólo es válida cuando la variación de índice de refracción es lenta y si suponemos que el campo es inicialmente monocromático, lo cual no es muy buena aproximación para pulsos muy cortos cuya curva espectral es ancha. En medios muy poco densos podemos utilizar para el índice de refracción la expresión (1.109), aproximando la raíz de forma que  $\eta \simeq 1 - \omega_p^2/2\omega_0^2 = 1 - N/2N_c$ . El salto en frecuencia será entonces

$$\Delta\omega \simeq \frac{\omega_0}{2cN_c} \int_0^L dx W(x,t)(N_0 - N). \quad (4.9)$$

donde para la variación de la densidad de electrones en el tiempo hemos usado la ecuación (3.63). Resulta evidente a partir de la expresión anterior que hay un desplazamiento en frecuencia de signo positivo y que este desplazamiento será mayor cuanto más rápida sea la ionización, más denso el medio y más larga la longitud de interacción. Es claro además que al aumentar la frecuencia fundamental, los armónicos que se generen también estarán desplazados.

En la figura 4.13 podemos ver cómo se generan y propagan los armónicos más bajos en un medio de densidad máxima  $N_0 = 0.1N_c$  en el caso de un pulso de amplitud máxima  $E_0 = 0.08$  u.a. Podemos ver el progresivo ensanchamiento de los picos y su leve desplazamiento hacia frecuencias más altas. La simulación está hecha con el modelo de cargas fijas.

En realidad el fenómeno no es tan sencillo. El desplazamiento al azul ocurre únicamente en la parte del pulso que va ionizando el medio, mientras que el resto

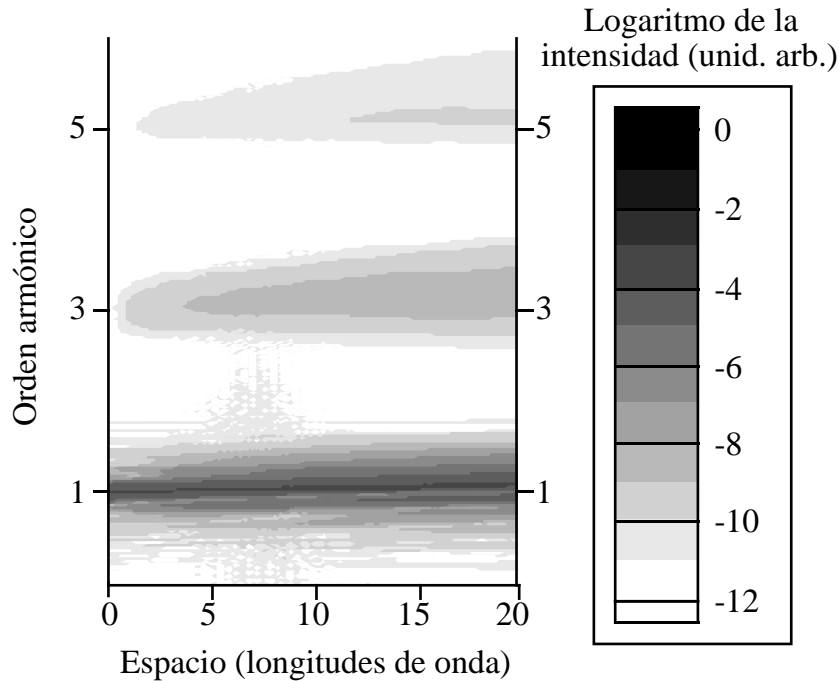


Figura 4.13: Evolución espacial de los armónicos en un medio de densidad máxima  $N_0 = 0.1N_c$  para un campo incidente de amplitud  $E_0 = 0.08$  u.a.

no lo sufre. En la figura 4.14 podemos ver dos momentos de la propagación del pulso dentro del medio, en este caso para una densidad máxima  $N_0 = 0.4N_c$  para la que los efectos de propagación son más acusados. Es bien visible una fuerte modulación de fase. La parte cercana al máximo, que es la que ioniza el material, se comprime, propagándose con una longitud de onda mucho más corta que la del campo incidente. Por su parte, la cola del pulso se va propagando sobre un medio cuya densidad, y por tanto su índice de refracción, varía suavemente. Como dicho índice es menor que la unidad, la longitud de onda es mayor que la del vacío. Esta modulación de fase y los continuos cambios en la "longitud de onda instantánea" repercuten en la frecuencia del pulso transmitido. Podemos ver la evolución temporal de ese campo transmitido en la figura 4.15. La amplitud máxima del pulso es un poco menor que el campo incidente, como es lógico, debido a la parte que se refleja, que para densidades subcríticas es pequeña (figura 4.3b).

En los dos detalles puede verse el aumento de la frecuencia cerca del centro del pulso y la pequeña disminución en su cola, que estaría desplazada hacia el rojo. Esto hace que el espectro total de los picos esté ensanchado, aunque al ser mucho más importante el corrimiento hacia el azul cuando el campo tiene la máxima amplitud, en promedio la frecuencia del pulso aumenta.

Hay bastantes referencias en la literatura sobre desplazamientos de frecuencias durante la propagación de campos no muy intensos en medios ionizables poco densos, tanto de carácter teórico [107, 110, 116, 119, 120, 121] como experimental [122, 123, 124].

Cuando el campo es muy intenso los desplazamientos de frecuencia son diferentes. En este caso la ionización es muy rápida, como ya hemos visto, y tiene lugar durante la falda inicial del pulso. Esta falda va arrastrando los electrones debido a la fuerza ponderomotriz y el resto del pulso se va encontrando una densidad menor que la media. El efecto es entonces el contrario al que hemos descrito antes y el desplazamiento medio se produce hacia frecuencias más bajas, siendo visible un pequeño corrimiento al rojo de los picos [85, 116]. Precisamente esa inhomogeneidad es la que genera las ondas de choque en un plasma. Otro caso distinto se produce cuando no es el propio pulso el que ioniza el medio sino que se encuentra con un frente de ionización (provocado por un pulso anterior o por cualquier otro medio) que se desplaza con velocidad relativista en sentido contrario. En este caso hay un desplazamiento al azul muy fuerte porque la frecuencia inicial no se propaga en el medio sino que cambia hasta una frecuencia final dada por la relación de dispersión en el plasma  $\omega_f^2 = \omega_0^2 + \omega_p^2$  [125, 126, 127]. Un efecto más que aparece con campos intensos es el Doppler, que también modifica la radiación de los electrones en movimiento, como ya hemos visto en la sección 1.5. Sin embargo, su contribución es generalmente menos importante que las anteriores.

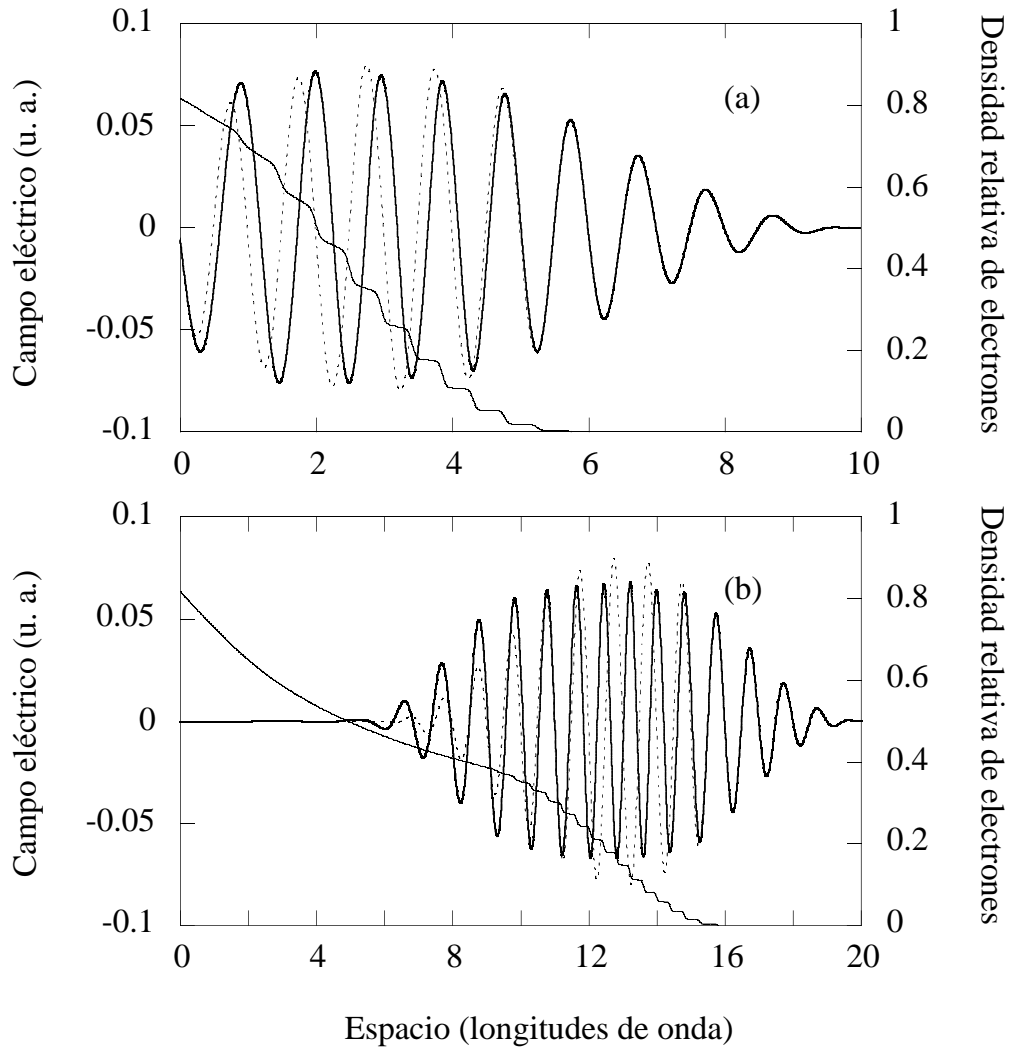


Figura 4.14: Propagación de un pulso de amplitud máxima  $E_0 = 0.08$  u.a. dentro de un medio con densidad máxima  $N_0 = 0.4N_c$ . La gráfica (a) muestra el campo dentro del medio (línea continua gruesa), el campo tal y como se propagaría en el vacío (línea discontinua) y el perfil de densidad de electrones dentro del medio (línea continua fina) diez ciclos después de que el pulso incidente alcance la superficie frontera. La gráfica (b) representa la situación veinte ciclos después del inicio.

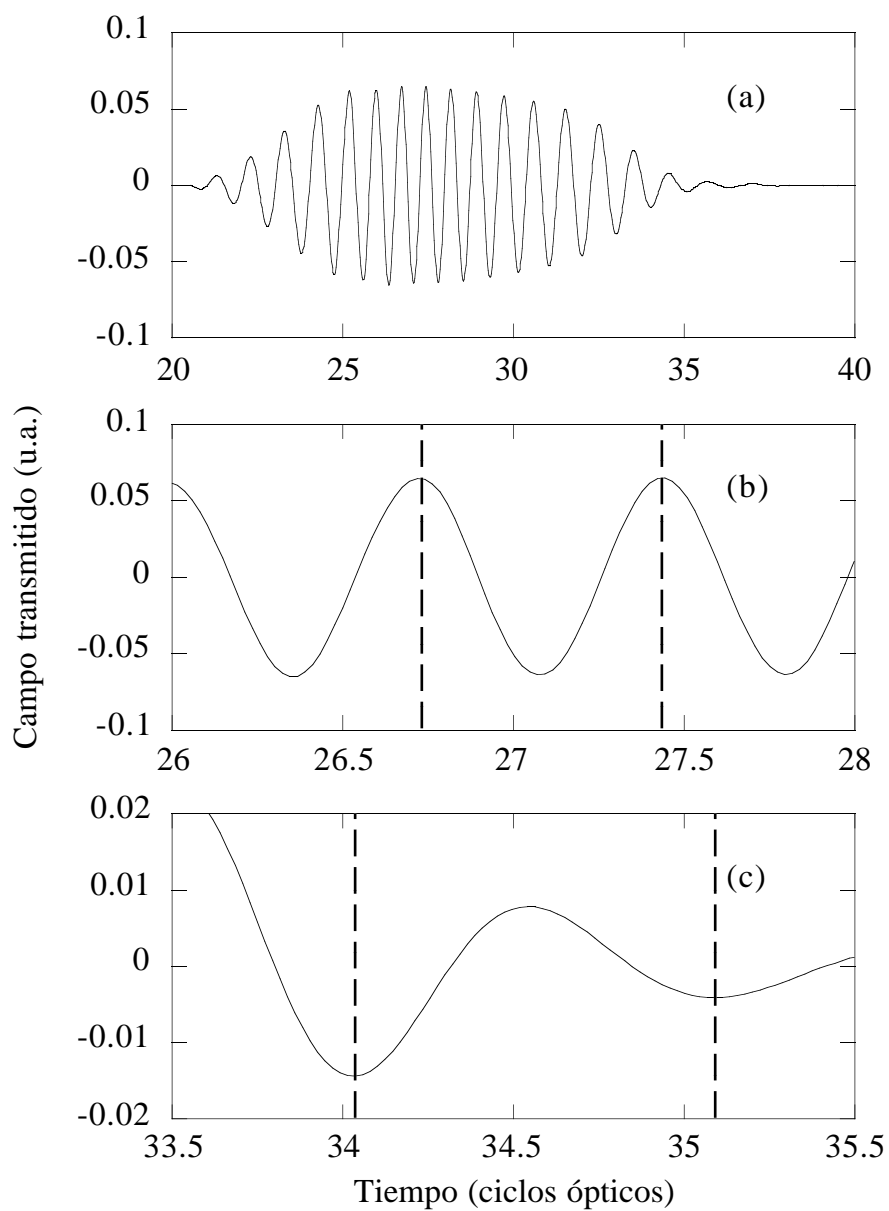


Figura 4.15: Pulso transmitido en el caso anterior tras atravesar una lámina de espesor  $20\lambda_0$  (a). Las gráficas (b) y (c) muestran detalles de la zona cercana al máximo del pulso y de su cola, respectivamente.

### 4.3.2 Desajustes de fase

Paralelamente a los cambios de frecuencia aparecen los desajustes de fase debidos al proceso de ionización y a la presencia de electrones libres, que como sabemos son muy importantes. Este desajuste de fase provocará un deterioro de los armónicos, que al cabo de una longitud de propagación más o menos larga desaparecerán. En el caso de un medio poco denso esta zona puede ser de bastantes longitudes de onda y el desajuste de fase depende del producto de la densidad de electrones por la longitud de propagación [113], pero para medios densos esto deja de ser cierto.

En la figura 4.16 podemos ver cómo se propagan los armónicos bajos para densidades mayores que la de la figura 4.13. Según aumenta la densidad los armónicos se van creando más cerca de la frontera y se ensanchan más rápidamente, por lo que muy pronto se pierde su visibilidad. Para densidades mayores que la crítica la variación es poco significativa puesto que gran parte del pulso se refleja y la ionización sólo es importante en una capa muy fina de la lámina, propagándose el resto del pulso en un medio con una densidad de electrones muy baja.

Debido al gran desajuste de fase que sufren los armónicos transmitidos en el medio cuando este tiene una densidad considerable, serán de mayor calidad los que se reflejan, que se generan en la capa fina en que hay ionización alta y luego se propagan en el vacío.

### 4.3.3 Filtro de armónicos en plasmas sobredensos [128]

Hemos estudiado en la sección anterior un efecto relacionado con la frecuencia de propagación del campo en un plasma poco denso, el desplazamiento hacia el azul. Cuando el medio es sobredenso el pulso incidente no puede propagarse en principio a lo largo de él, siendo reflejado casi totalmente y disminuyendo su amplitud dentro del medio de forma exponencial. Cuando el campo es lo suficientemente intenso para generar armónicos por el mecanismo de la fuerza magnética y dependiendo



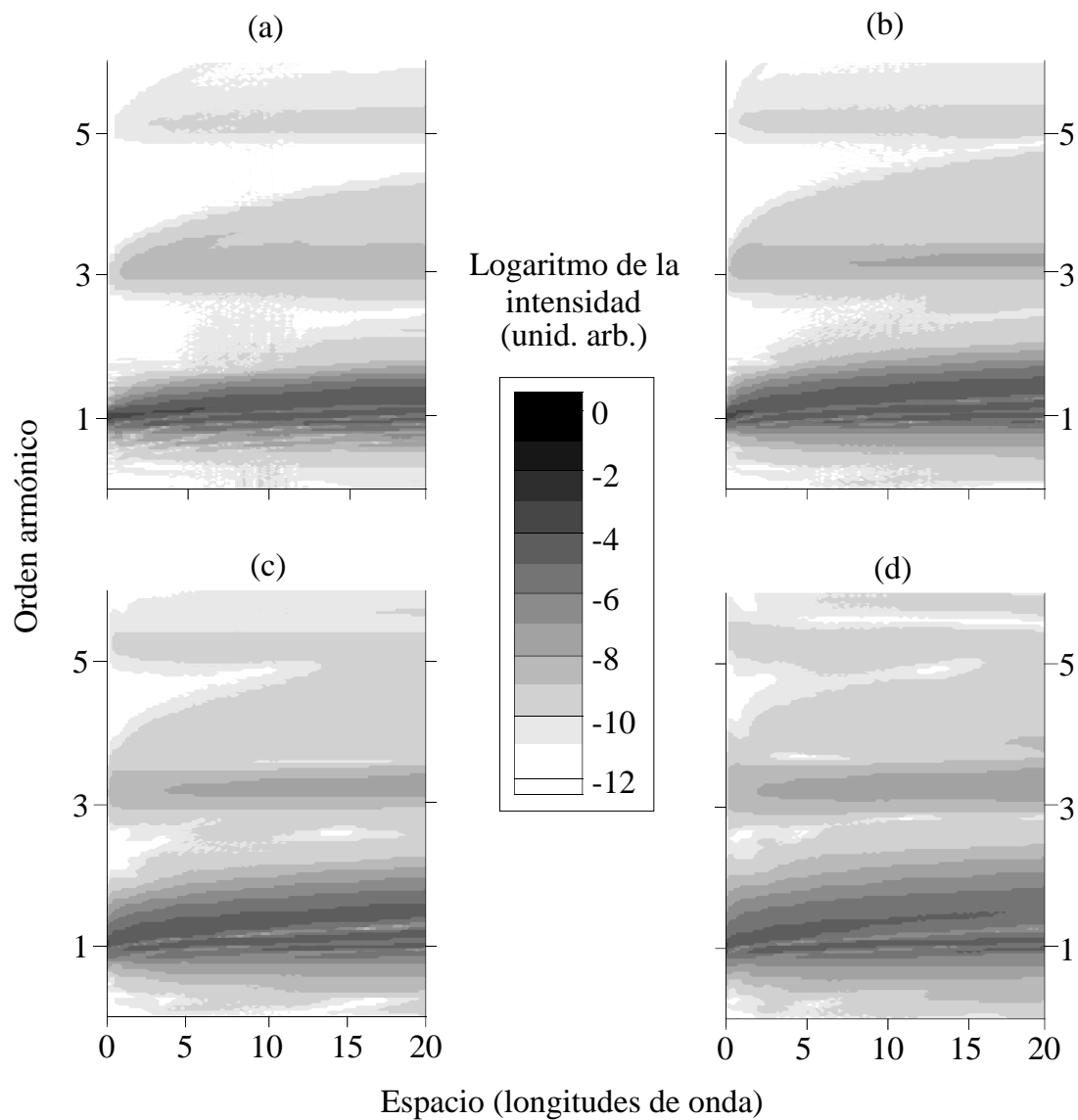


Figura 4.16: Propagación de los armónicos debidos a la ionización en el medio para densidades  $N_0 = 0.4N_c$  (a),  $N_c$  (b),  $2N_c$  (c) y  $5N_c$  (d). La amplitud del campo es siempre  $E_0 = 0.08$  u.a.

de la densidad del medio, alguna de las frecuencias armónicas puede ser mayor que la frecuencia del plasma, pudiendo propagarse sin problemas. De este modo puede ocurrir que los armónicos más bajos se reflejen, mientras que el campo transmitido sólo contenga armónicos altos, actuando el medio como un filtro de las frecuencias bajas. Este efecto ha sido observado en simulaciones numéricas [129] y experimentalmente [130] y puede ser utilizado para estimar la densidad de electrones del medio de una manera directa.

Esto es así en el caso de un plasma preformado pero si el plasma es generado por el propio pulso e inicialmente el medio es transparente, el campo puede penetrar en él hasta que la densidad de electrones ionizados supere el valor crítico para su frecuencia, como ya hemos visto más arriba. Dependiendo entonces de la rapidez con la que se ionice el material la transmisión del campo incidente será mayor o menor. Además hay que tener en cuenta que la ionización no es homogénea, especialmente cuando el espesor del medio es suficientemente grande. En este caso habrá una capa muy delgada de medio completamente ionizada que atenuará el campo transmitido. El resultado es que el pulso será inicialmente absorbido pero la parte evanescente que logra atravesar la capa ionizada, tan pronto como tenga una intensidad tan baja que no le permita seguir ionizando la lámina, se propagará a través de un medio transparente y no quedará totalmente filtrada.

Vamos a comenzar con el caso de una lámina preionizada, que es el más sencillo. El grosor de la lámina será igual a una longitud de onda del campo incidente, cuya frecuencia es como siempre  $\omega_0 = 0.05$  u.a. En la figura 4.17 podemos ver el espectro del campo transmitido cuando  $E_0 = 0.5$  u.a. y  $N_0 = 7N_c$  (a) y  $E_0 = 4$  u.a. y  $N_0 = 15N_c$ . Dado que la densidad crítica para los armónicos es  $N_c^{(m)} = \omega_m^2/4\pi = m^2N_c$ , en el caso (a) el medio es sobredenso para la frecuencia fundamental pero subdenso para todos sus armónicos impares, mientras que en el caso (b) también es sobredenso para el tercer armónico y subdenso para los siguientes. Los resultados

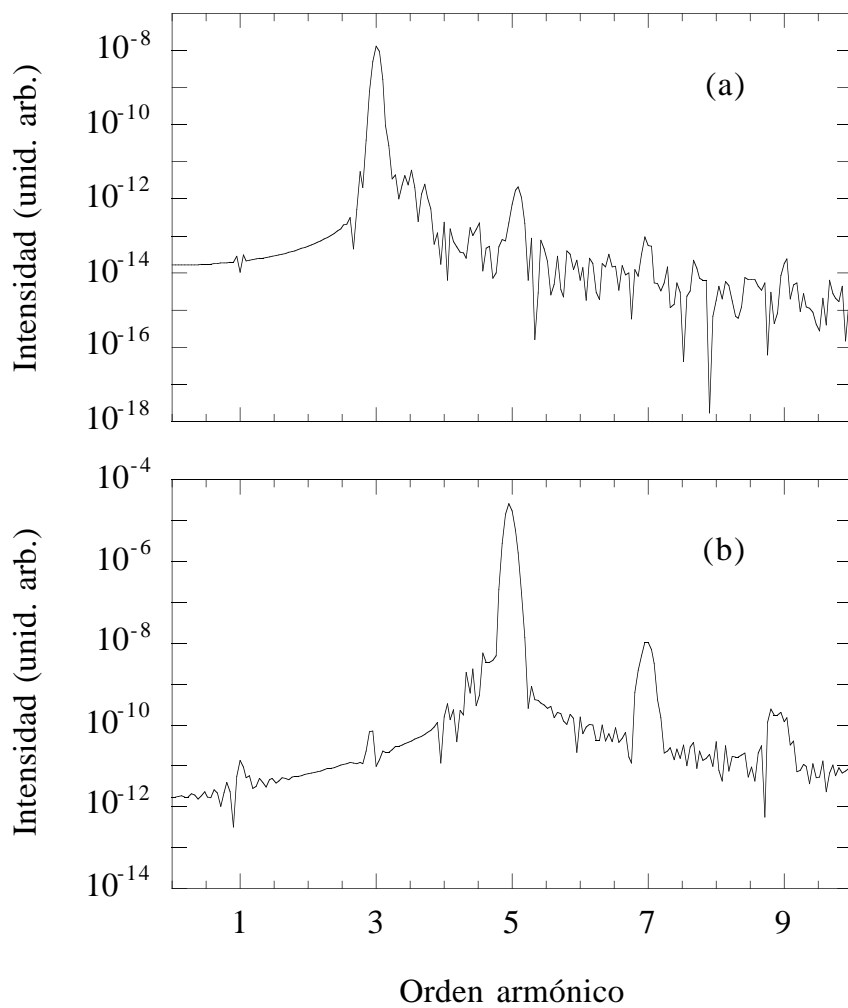


Figura 4.17: Espectro del campo transmitido a través de una lámina preionizada de espesor  $\lambda_0$ . La densidad del medio y la amplitud máxima del pulso incidente son respectivamente  $N_0 = 7N_c$ ,  $E_0 = 0.5$  u.a. (a);  $N_0 = 15N_c$ ,  $E_0 = 4$  u.a. (b).

de las simulaciones están perfectamente de acuerdo con lo esperado en ambos casos y los armónicos son bastante visibles, sobre todo en el caso del campo más intenso y el medio más denso.

En la figura 4.18 podemos ver los pulsos transmitidos cuyos espectros hemos mostrado antes. Se ve cómo inicialmente no se propaga nada pero luego va apareciendo un pulso más corto y mucho menos intenso de frecuencia la del armónico correspondiente. El máximo del pulso transmitido corresponde aproximadamente con el máximo del pulso incidente, lo cual es lógico pues es en ese momento cuando mayores serán las oscilaciones de la superficie y por tanto los armónicos (el retraso de aproximadamente tres ciclos se debe a que estamos midiendo el pulso transmitido en un punto situado dos longitudes de onda más allá del fin de la lámina, cuyo espesor es otra longitud de onda).

Vayámonos ya al caso en que el medio no está preionizado sino que es el propio pulso el que genera el plasma. La figura 4.19 muestra el pulso transmitido y su espectro cuando  $E_0 = 0.5$  u.a. y  $N_0 = 7N_c$ . Se observa cómo el pulso se propaga, aunque su amplitud varía de forma un tanto extraña y en el espectro no hay señales de filtro sino que aparecen los picos característicos de la ionización, anchos y desplazados al azul. En la figura 4.20 podemos ver la evolución de la densidad de electrones correspondiente a este caso, que puede ayudarnos a comprender mejor lo que ocurre. El campo incidente entra en el medio sin encontrar resistencia pues su amplitud inicial no es suficiente para ionizarlo (esto corresponde al pico inicial en el campo transmitido). Sin embargo, una vez que la amplitud aumenta, el medio se ioniza no de forma homogénea sino decreciente a lo largo del medio. Aproximadamente cuando el pulso alcanza su máximo se alcanza un régimen estacionario con una capa totalmente ionizada de pequeño espesor. Si ese espesor es menor que la longitud de penetración del campo, la parte evanescente es capaz de atravesarlo y propagarse sin mayor problema pues su amplitud es insuficiente para provocar

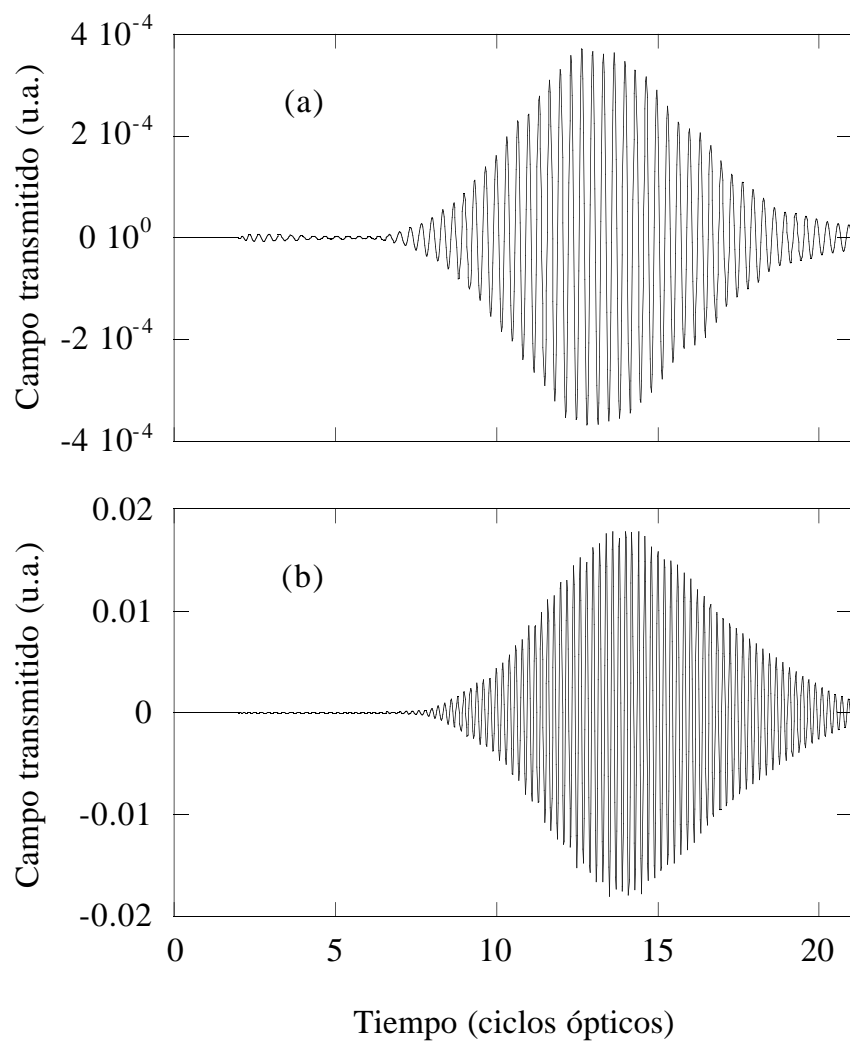


Figura 4.18: Pulsos transmitidos cuyos espectros eran los de la figura 4.17.

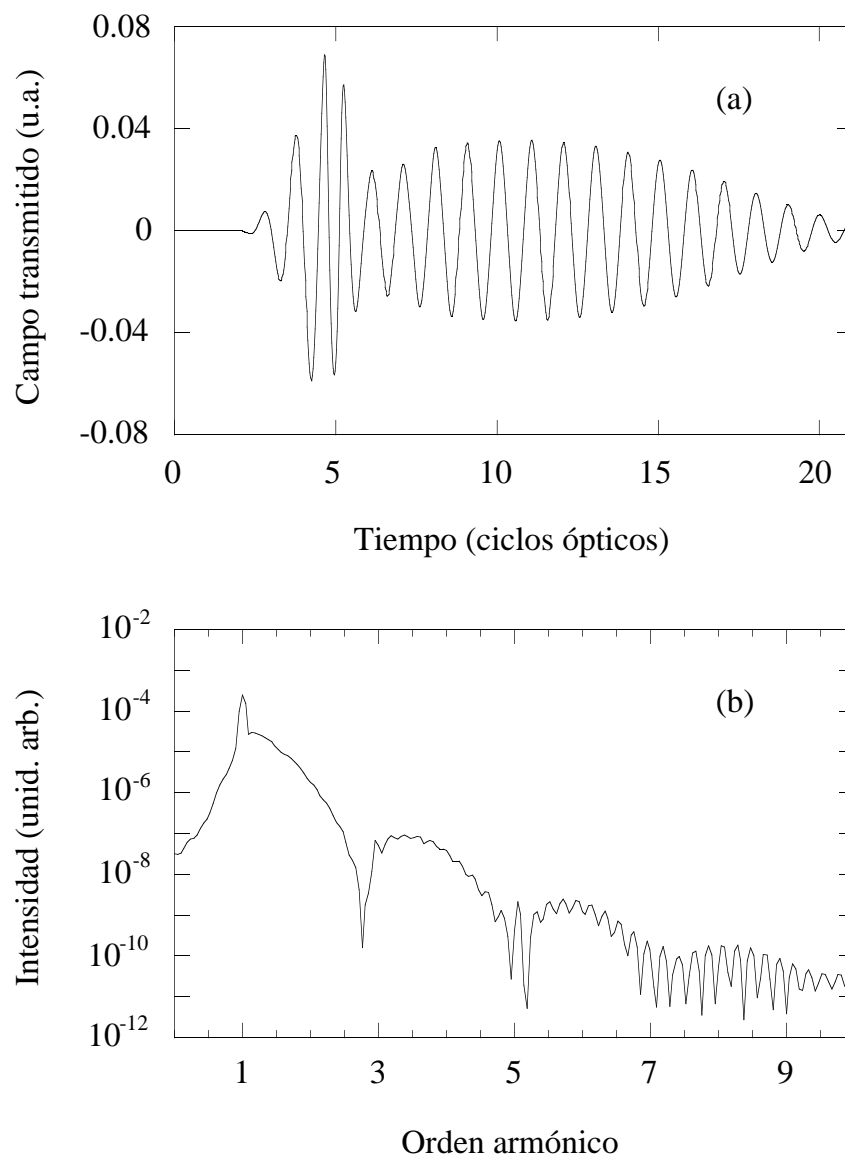


Figura 4.19: Pulso transmitido (a) y su espectro (b) para un campo de amplitud  $E_0 = 0.5$  u.a. que incide sobre una lámina inicialmente transparente de espesor  $\lambda_0$  y densidad  $N_0 = 7N_c$ .

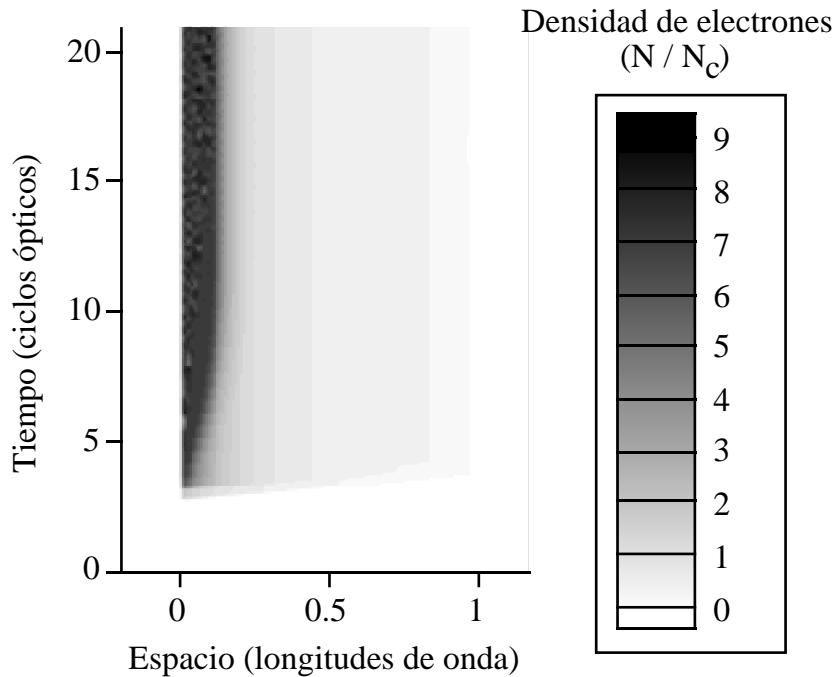


Figura 4.20: Evolución espaciotemporal de la densidad de electrones correspondiente a los parámetros de la figura 4.19.

una ionización apreciable en el resto de la lámina y sólo sufrirá efectos de desajuste de fase, pero no una fuerte atenuación. Eso es precisamente lo que ocurre en este caso.

Si aumentamos la amplitud del campo hasta  $E_0 = 4$  u.a. obtenemos los resultados de las figuras 4.21 y 4.22. El pulso comienza a propagarse pero tan pronto como va ionizando el medio, la parte transmitida tiene una frecuencia triple de la inicial. En el espectro se aprecia esto claramente, pues el tercer armónico es dos órdenes de magnitud más intenso que el fundamental, que ha sido filtrado. En la gráfica de la densidad vemos cómo la ionización se produce lentamente hasta que llega el máximo del pulso, cuya parte evanescente tiene intensidad suficiente para ionizar toda la lámina. Así, la capa sobredensa de la lámina es más larga que la longitud de penetración de la componente fundamental, que es filtrada, pero no afecta a la propagación del resto de armónicos, que se generan principalmente en

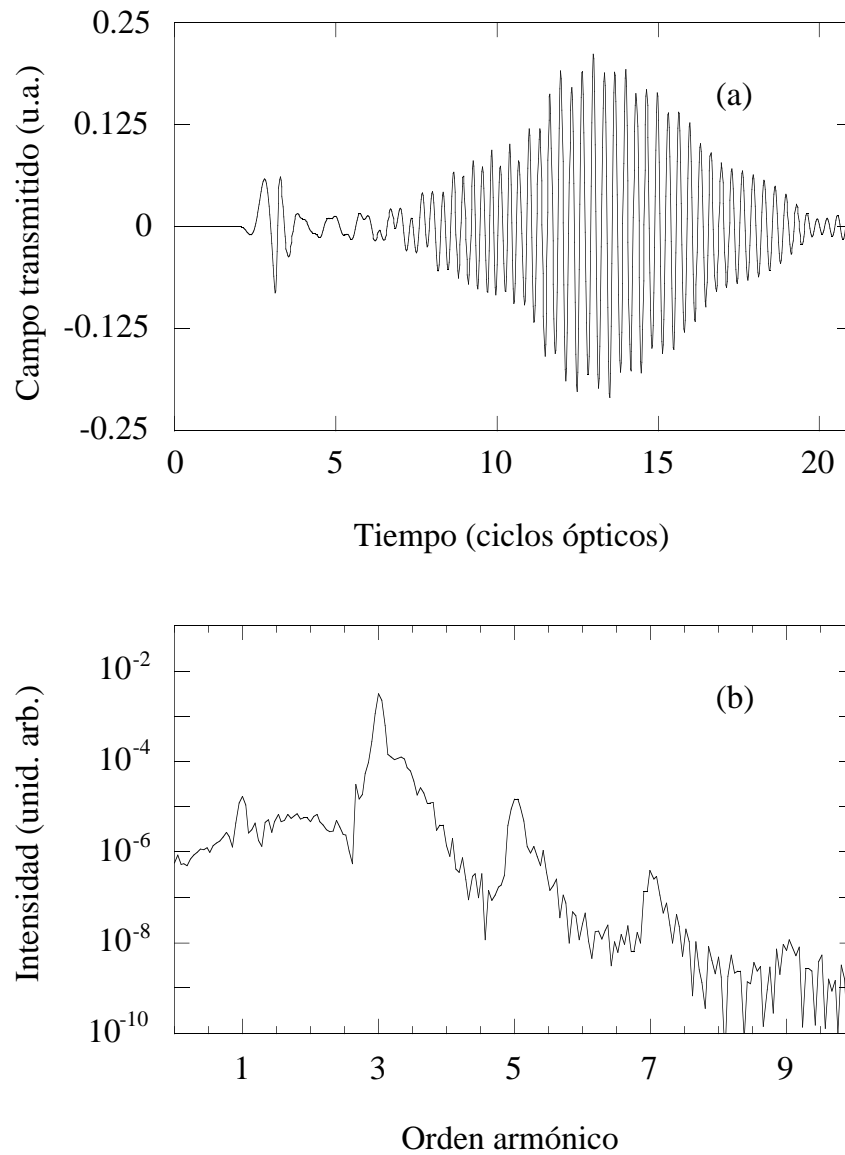


Figura 4.21: Pulso transmitido (a) y su espectro (b) para un campo incidente sobre una lámina inicialmente transparente de espesor  $\lambda_0$  y densidad  $N_0 = 7N_c$  cuya amplitud es  $E_0 = 4$  u.a.



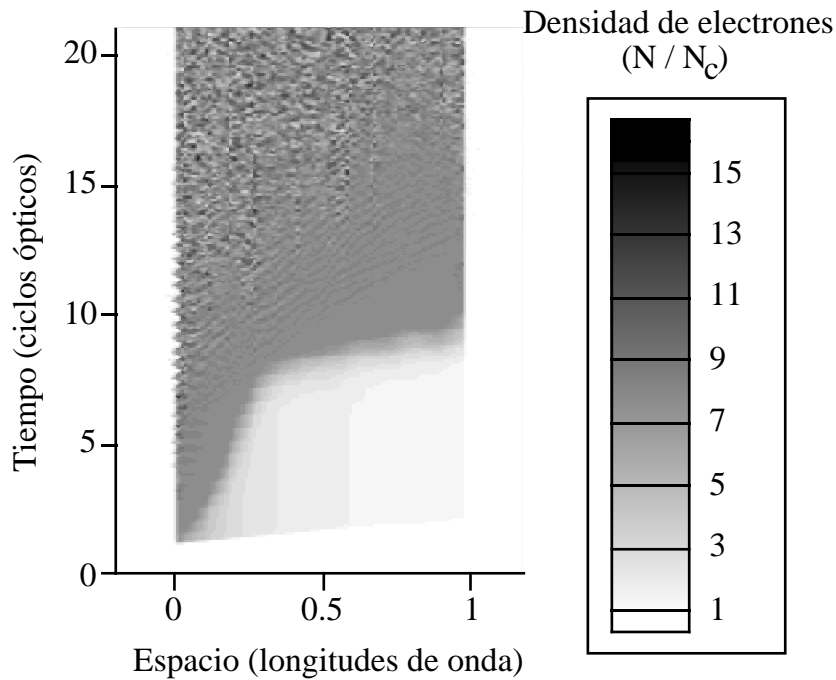


Figura 4.22: Evolución espaciotemporal de la densidad de electrones correspondiente a los parámetros de la figura 4.21.

la superficie frontera.

Un último ejemplo aún más interesante es el de las figuras 4.23 y 4.24, en las cuales el campo sigue teniendo  $E_0 = 4$  u.a. pero el medio es aún más denso,  $N_0 = 15N_c$ . Si mirásemos únicamente el espectro podríamos pensar que, a pesar de la alta densidad de la lámina, el filtro no es perfecto y deja pasar parte del primer y tercer armónicos. Pero en la evolución del campo transmitido se ve claramente que lo que ocurre es algo más complicado y que el pulso a la salida tiene una frecuencia claramente variable en el tiempo, lo que en la literatura recibe el nombre de *chirp*, aunque en este caso no es una variación suave: la primera parte tiene la frecuencia del campo incidente, luego cambia a una frecuencia  $3\omega_0$  y finalmente hay otro salto hasta  $5\omega_0$ . El mecanismo generador de estos cambios de frecuencia es la evolución temporal de la propiedad filtradora de la lámina según el proceso de ionización va aumentando la densidad de electrones hasta valores sobrecríticos en primer lugar

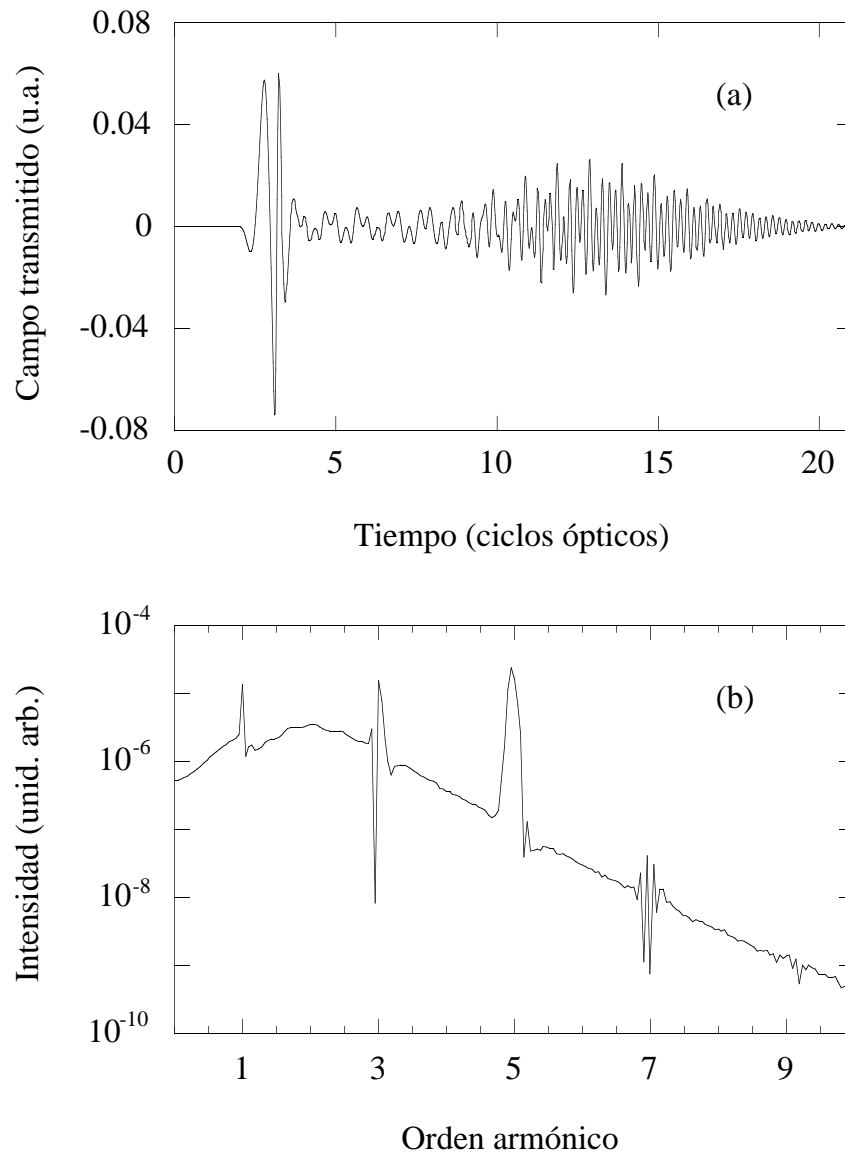


Figura 4.23: Pulso transmitido (a) y su espectro (b) para un campo incidente sobre una lámina inicialmente transparente de espesor  $\lambda_0$  y densidad  $N_0 = 15N_c$  cuya amplitud es  $E_0 = 4$  u.a.

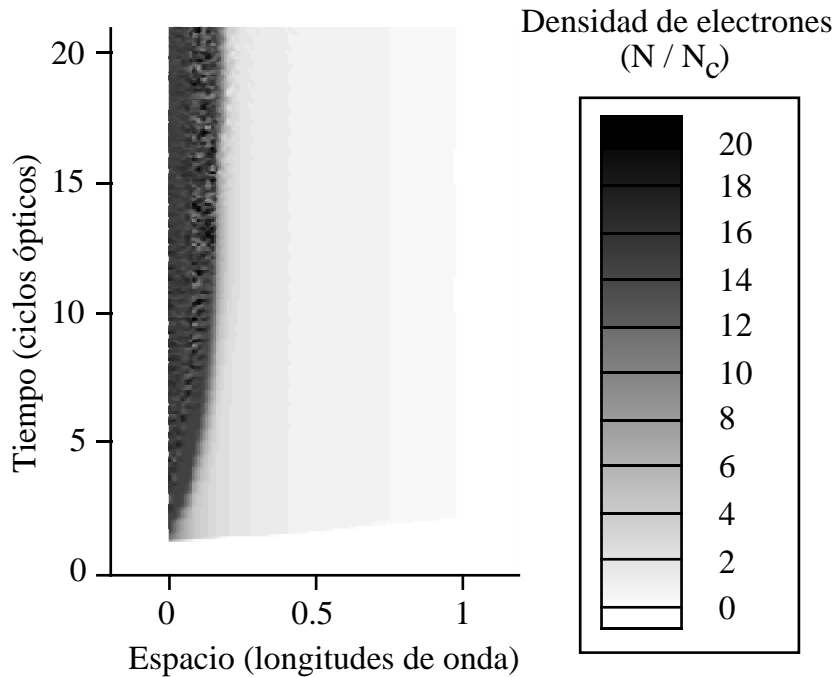


Figura 4.24: Evolución espaciotemporal de la densidad de electrones correspondiente a los parámetros de la figura 4.23.

para la frecuencia fundamental y luego para su tercer armónico.

Este filtro dependiente del tiempo puede entenderse bien a partir de la figura 4.24. La primera parte del pulso entra en el medio, ionizando una capa muy fina. Esto corresponde al pico inicial de máxima amplitud en el pulso transmitido. En unos dos ciclos, la amplitud del campo incidente crece lo suficiente para ionizar una zona de espesor mayor que la longitud de penetración del armónico fundamental, que se refleja totalmente. En ese momento ocurre el primer salto de frecuencia de  $\omega_0$  a  $3\omega_0$ . El tercer armónico, generado en la superficie, se propaga en el medio hasta el octavo ciclo, cuando la capa ionizada es sobredensa para él en una distancia superior a su longitud de penetración. Esto corresponde al décimo ciclo del campo transmitido. Después de ese momento el plasma filtra el primer y tercer armónicos, siendo transparente para los restantes.

Otro punto importante que conviene remarcar es que los pulsos transmitidos

cuando la lámina no está preionizada son bastante más intensos que cuando lo está, cosa lógica puesto que inicialmente el medio es transparente y además su espesor efectivo al final es menor que el total de la lámina. Esto hay que tenerlo en cuenta a la hora de estimar la transmitividad en los experimentos, en algunos de los cuales se ha encontrado que el campo transmitido es mucho mayor de lo que cabría esperar [131, 132]. Esta alta transmitividad debe estar también influida por efectos relativistas tales como la transparencia autoinducida por la disminución de la frecuencia de plasma efectiva debida al aumento de masa inercial de los electrones o la formación de canales debido a efectos transversales de autoenfoco del haz, e incluso a la presencia de campos magnéticos muy intensos provocados por la propia ionización, pero ninguno de estos factores explica por sí solo una transmitividad tan alta para intensidades del láser por debajo de  $10^{18}\text{W}/\text{cm}^2$ , en principio menores del valor crítico para el cual comienzan a aparecer.

Hemos visto entonces que la dinámica de la ionización es importante no sólo para la propia generación de armónicos sino para su propagación en el medio ionizado. Este último ejemplo del filtrado de los armónicos puede ser útil para obtener pulsos de características muy especiales tanto en su perfil temporal como en su frecuencia, además de ser un excelente método de medida de densidades máximas de plasma.

# Conclusiones

A lo largo del presente trabajo hemos estudiado la interacción de un campo electromagnético intenso con medios ionizables tratando de entender mejor la generación y propagación de armónicos en dichos medios. Nuestro estudio ha tenido un carácter puramente teórico y de simulación numérica, integrando las ecuaciones de evolución correspondientes a cada modelo. Estos modelos han consistido en simplificaciones bastante drásticas de la realidad, pero los resultados obtenidos con ellos son consistentes, al menos de forma cualitativa, con resultados de modelos más complicados e incluso con los experimentos.

Recapitemos las conclusiones que podemos extraer de nuestro trabajo:

## **Respecto a la generación de armónicos en átomos [95, 96]**

Hemos propuesto un nuevo modelo que enriquece el de un sistema de dos niveles incorporando la ionización y la recombinación coherente.

- Se ha comprobado la importancia de la dependencia temporal de las tasas de ionización en la generación de armónicos, factor que no se había tenido en cuenta hasta la fecha en el estudio de este proceso. La variación rápida de las poblaciones de los estados genera nuevas oscilaciones en el dipolo que se traducen en armónicos de orden alto. Este mecanismo es imprescindible para entender las frecuencias intermedias del espectro.

- Incorporando la recombinación mediante una aproximación semiclásica, se ha visto el papel fundamental que desempeñan las transiciones entre estados ligados en los armónicos generados por átomos incluso cuando la ionización es importante, en particular en el régimen de túnel. Podemos decir que dichas transiciones actúan como resonadores de las oscilaciones inducidas por los estados del continuo al recombinarse, amplificándolas y aumentando la intensidad de los armónicos.

### **Respecto a la simulación de la interacción de campos intensos con sólidos [104]**

- Se ha desarrollado un código de partículas para estudiar la evolución de un plasma. En dicho código hemos resuelto las ecuaciones para los campos electromagnéticos utilizando las soluciones retardadas para los potenciales, respetando así los efectos de causalidad.
- Se ha añadido en el código la posibilidad de fotoionización, permitiendo así un estudio de la dinámica de formación del plasma que no había sido realizado hasta la fecha.
- Se ha observado la importancia de ciertos efectos relativistas que aparecen en las simulaciones como consecuencia de la inclusión de los potenciales retardados de Liénard-Wiechert. Estos efectos no habían sido estudiados con anterioridad, hasta donde nosotros sabemos.
- Se ha desarrollado otro código más sencillo, que llamamos de cargas fijas, para estudiar la propagación de un pulso en un medio ionizable que nos permite desligar el efecto de la ionización de los propios de los fenómenos colectivos en un plasma.

**Respecto a la generación de armónicos en plasmas [114, 115, 118]**

La generación de armónicos en plasmas puede deberse a dos procesos bien distintos, la ionización y la dinámica relativista de los electrones. El estudio de ambos mecanismos nos conduce a las siguientes conclusiones:

- Se han estudiado los armónicos generados por ionización inhomogénea y dependiente del tiempo en medios extensos, observando que pueden ser visibles no sólo en el campo transmitido en gases subcríticos sino también en los campos reflejados en medios con densidades próximas y superiores a la crítica.
- Se ha investigado la importancia relativa de los dos procesos, estableciendo los regímenes en los que cada uno de ellos es más importante, encontrando que el cociente entre el tiempo de ionización y la duración total del pulso es un buen parámetro para discriminar dichos regímenes. Si el campo no es lo suficientemente intenso como para generar armónicos debidos al movimiento relativista de los electrones, la ionización es decisiva puesto que será el único mecanismo generador de armónicos. Cuando el campo sí tiene intensidad suficiente para generar armónicos relativistas, la ionización es importante cuando el tiempo durante el cual se produce es al menos una quinta parte de la duración total del pulso. La aproximación habitual de suponer un plasma preionizado es en este caso absolutamente errónea.

**Respecto a los efectos de propagación [128]**

- En el caso de los armónicos generados por la ionización, hemos observado el efecto de corrimiento al azul según se van propagando en el medio y la pérdida de visibilidad debida al desajuste de fase que hace que los armónicos desaparezcan al cabo de unas pocas longitudes de onda. Los armónicos reflejados, al propagarse en el vacío, no sufren efectos de desajuste de fase y

son más fácilmente visibles que los que se propagan dentro del medio.

- En el caso de medios preionizados muy densos hemos visto cómo los armónicos debidos a la dinámica relativista de los electrones pueden ser filtrados y no aparecer en el campo transmitido para láminas lo suficientemente gruesas. En el caso de láminas no preionizadas el filtrado es dependiente del tiempo al ir creciendo la densidad de electrones libres a medida que el pulso ioniza el medio. El resultado es un pulso transmitido cuya frecuencia aumenta de forma escalonada.



# Bibliografía

- [1] N. B. Delone y V. P. Krainov, *Multiphoton Processes in Atoms*, (Springer-Verlag, Berlin, 1994).
- [2] A. Einstein, Ann. Physik **17**, 132 (1905). Traducido al inglés en A. B. Arons y M. B. Peppard, Am. J. Phys. **33**, 367 (1965).
- [3] L. V. Keldysh, Sov. Phys. JETP **20**, 1307 (1965).
- [4] *Atoms in Intense Laser Fields*, editado por M. Gavrilá (Academic Press, Boston, 1992).
- [5] K. Burnett, V. C. Reed y P. L. Knight, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **26**, 561 (1993).
- [6] P. Moreno, *Tesis Doctoral: Generación de armónicos en H y H<sub>2</sub><sup>+</sup> sometidos a pulsos láser intensos*, (Universidad de Salamanca, 1996).
- [7] M. Protopapas, C. H. Keitel y P. L. Knight, Rep. Prog. Phys. **60**, 389 (1997).
- [8] L. A. Lompré, G. Mainfray, C. Manus y J. Thebault, Phys. Rev. A **15**, 1604 (1977).
- [9] P. Agostini, F. Fabre, G. Mainfray, G. Petite y N. Rahman, Phys. Rev. Lett. **42**, 1127 (1979).

- [10] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Mecánica Cuántica No-Relativista*, (Reverté, Barcelona, 1972).
- [11] M. Büttiker y R. Landauer, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 1739 (1982).
- [12] K. Rzazewski y L. Roso, *Laser Physics* **3**, 310 (1993).
- [13] P. W. Milonni y B. Sundaram, en *Progress in Optics XXXI*, editado por E. Wolf (Elsevier, Amsterdam, 1993).
- [14] V. P. Krainov, *J. Opt. Soc. Am. B* **14**, 425 (1997).
- [15] M. V. Ammosov, N. B. Delone y V. P. Krainov, *Sov. Phys. JETP* **64**, 1191 (1986).
- [16] F. H. M. Faisal, *J. Phys. B* **6**, L89 (1973).
- [17] H. R. Reiss, *Phys. Rev. A* **22**, 1786 (1980).
- [18] G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists*, (Academic Press, San Diego, 1985).
- [19] L. Mandel y E. Wolf, *Optical Coherence and Quantum Optics*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [20] F. A. Ilkov, J. E. Decker y S. L. Chin, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25**, 4005 (1992).
- [21] G. E. Bayfield y P. M. Koch, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 258 (1974).
- [22] M. Dörr, R. M. Potvliege y R. Shakeshaft, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2003 (1990).
- [23] H. A. Bethe, y E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two- Electron Atoms*, (Plenum, New York, 1977).

- [24] R. Shakeshaft, R. M. Potvliege, M. Dörr y W. E. Cooke, *Phys. Rev. A* **42**, 1656 (1990).
- [25] D. Bauer, *Phys. Rev. A* **55**, 2180 (1997).
- [26] S. Augst, D. D. Meyerhofer, D. Strickland y S. L. Chin, *J. Opt. Soc. Am. B* **8**, 858 (1991).
- [27] P. A. Franken, A. E. Hill, C. W. Peters y G. Weinrich, *Phys. Rev. Lett.* **7**, 118 (1961).
- [28] J. A. Armstrong, N. Bloembergen, J. Ducuing y P. S. Pershan, *Phys. Rev.* **127**, 1918 (1962).
- [29] Z. Chang, A. Rundquist, H. Wang, M. M. Murnane y H. C. Kapteyn, *Phys. Rev. Lett* **79**, 2967 (1997).
- [30] Véase P. Salières, A. L'Huillier, Ph. Antoine y M. Lewenstein, *Adv. in At., Mol. and Opt. Phys.*, próxima aparición, y las referencias allí incluidas.
- [31] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, (John Wiley and Sons, New York, 1975).
- [32] P. M. Morse y H. Feshbach *Methods of Theoretical Physics*, (McGraw Hill, New York, 1953).
- [33] G. Scharf, *From Electrostatic to Optics. A Concise Electrodynamics Course*, (Springer-Verlag, Berlin, 1994).
- [34] P. L. Knight y P. W. Milonni, *Phys. Rep.* **66**, 21 (1980).
- [35] B. W. Shore, *The Theory of Coherent Atomic Excitation*, (John Wiley and Sons, New York, 1990).

- [36] B. Sundaram y P. W. Milonni, *Phys. Rev. A* **41**, 6571 (1990).
- [37] J. D. Cresser, *Phys. Rep.* **94**, 47 (1983).
- [38] L. Mandel y E. Wolf, *Optical Coherence and Quantum Optics*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).
- [39] F. I. Gauthey, C. H. Keitel, P. L. Knight y A. Maquet, *Phys. Rev. A* **52**, 525 (1995).
- [40] K. J. LaGattuta, *J. Mod. Opt.* **39**, 1181 (1992).
- [41] K. Burnett, V. C. Reed, J. Cooper y P. L. Knight, *Phys. Rev. A* **45**, 3347 (1992).
- [42] J. L. Krause, K. J. Schafer y K. C. Kulander, *Phys. Rev. A* **45**, 4998 (1992).
- [43] K. J. LaGattuta, *Phys. Rev. A* **48**, 666 (1993).
- [44] J. Parker, K. T. Taylor, C. W. Clark, y S. Blodgett-Ford, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29**, L33 (1996).
- [45] K. T. Taylor, J. S. Parker, D. Dundas, E. Smyth y S. Vivirito, en *Multiphoton Processes 1996*, editado por P. Lambropoulos y H. Walther (IOP Publishing, London, 1997).
- [46] H. B. van Linden van den Heuvell y H. G. Muller, en *Multiphoton Processes*, editado por S. J. Smith y P. L. Knight, (Cambridge University Press, Cambridge, 1988).
- [47] T. F. Gallagher, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2304 (1988).
- [48] P. B. Corkum, *Phys. Rev. Lett* **71**, 1994 (1993).

- [49] K. C. Kulander y K. J. Schafer, en *Proc. Int. Conf. Multiphoton Processes VI*, editado por D. K. Evans (World Scientific, Singapur, 1993).
- [50] P. Moreno, L. Plaja, V. Malyshev y L. Roso, *Phys. Rev. A* **51**, 4746 (1995).
- [51] M. Lewenstein, Ph. Balcou, M. Yu. Ivanov, A. L'Huillier y P. B. Corkum, *Phys. Rev. A* **49**, 2117 (1994).
- [52] K. C. Kulander, *Phys. Rev. A* **35**, 445 (1987).
- [53] K. C. Kulander, *Phys. Rev. A* **36**, 778 (1988).
- [54] P. L. DeVries, *J. Opt. Soc. Am. B* **7**, 517 (1990).
- [55] K. J. LaGattuta, *J. Opt. Soc. Am. B* **7**, 639 (1990).
- [56] A. Sanpera, *PhD Thesis: Theoretical Study of the Photoionization of Isolated Atoms by Intense Laser Pulses*, (Universitat Autònoma de Barcelona, 1992).
- [57] U. Schwengelbeck y F. H. M. Faisal, *Phys. Rev. A* **50**, 632 (1994).
- [58] J. Javanainen, J. H. Eberly y Q. Su, *Phys. Rev. A* **38**, 3430 (1988).
- [59] Q. Su y J. H. Eberly, *J. Opt. Soc. Am. B* **7**, 564 (1990).
- [60] Q. Su, J. H. Eberly y J. Javanainen, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 862 (1990).
- [61] Q. Su y J. H. Eberly, *Phys. Rev. A* **44**, 5997 (1991).
- [62] Q. Su, *PhD Thesis: Ionization of a model atomic system by short intense laser pulses*, (University of Rochester, 1991).
- [63] E. S. Sarachik y G. T. Schappert, *Phys. Rev. A* **1**, 2738 (1970).
- [64] P. Gibbon, *IEEE J. Quantum Electronics* **33**, 1915 (1997).

- [65] C. H. Keitel, C. Szymanowski, P. L. Knight y A. Maquet, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31** L75 (1998).
- [66] X. F. Li, A. L'Huillier, M. Ferray, L. A. Lompré y G. Mainfray, *Phys. Rev. A* **39**, 5751 (1989).
- [67] A. L'Huillier, X. F. Li y L. A. Lompré, *J. Opt. Soc. Am. B* **7**, 527 (1990).
- [68] A. L'Huillier, Ph. Balcou, S. Candel, K. J. Schafer y K. C. Kulander, *Phys. Rev. A* **46**, 2778 (1992).
- [69] A. L'Huillier, L. A. Lompré, G. Mainfray y C. Manus, en *Atoms in Intense Laser Fields*, editado por M. Gavrila (Academic Press, Boston, 1992).
- [70] M. Ll. Pons y L. Plaja, *J. Mod. Opt.* **43**, 1939 (1996).
- [71] A. E. Siegman, *Lasers*, (University Science Books, Mill Valley, 1986).
- [72] M. Born y E. Wolf, *Principles of Optics*, (Pergamon Press, Oxford, 1989).
- [73] U. Mohideen, H. W. K. Tom, R. R. Freeman, J. Bokor y P. H. Bucksbaum, *J. Opt. Soc. Am. B* **12**, 2190 (1992).
- [74] W. L. Kruer *The Physics of Laser Plasma Interactions*, (Addison-Wesley, New York, 1988).
- [75] *Superstrong Fields in Plasmas*, editado por M. Lontano, G. Mourou, F. Pegoraro y E. Siondi, (AIP Conference Proceedings 426, New York, 1998).
- [76] J. N. Bardsley, B. M. Penetrante y M. H. Mittleman, *Phys. Rev. A* **40**, 3823 (1989).
- [77] P. Sprangle, E. Esarey y A. Ting, *Phys. Rev. A* **41**, 4463 (1990).

- [78] N. H. Burnett, H. A. Baldis, M. C. Richardson y G. D. Enright, *Appl. Phys. Lett.* **31**, 172 (1977).
- [79] R. L. Carman, D. W. Forslund y J. M. Kindel, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 29 (1981).
- [80] R. L. Carman, C. K. Rhodes y R. F. Benjamin, *Phys. Rev. A* **24**, 2649 (1981).
- [81] P. A. Norreys, M. Zepf, S. Moustazis, A. P. Fews, J. Zhang, P. Lee, M. Bakazeros, C. N. Danson, A. Dyson, P. Gibbon, P. Loukakos, D. Neely, F. N. Walsh, J. S. Wark y A. E. Dangor, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 1832 (1996).
- [82] S. C. Wilks, W. L. Kruer y W. B. Mori, *IEEE Trans. Plasma Sci.* **21**, 120 (1993).
- [83] S. V. Bulanov, N. M. Naumova y F. Pegoraro, *Phys. Plasmas* **1**, 745 (1994).
- [84] P. Gibbon, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 50 (1996).
- [85] R. Lichters, J. Meyer-ter-Vehn y A. Pukhov, *Phys. Plasmas* **3**, 3425 (1996).
- [86] D. von der Linde y K. Rzazewski, *Appl. Phys. B* **63**, 499 (1996).
- [87] K. Rzazewski, comunicación privada.
- [88] L. Allen y J. H. Eberly, *Optical Resonance and Two-level Atoms*, (Dover Publications, New York, 1987).
- [89] L. Plaja, *PhD Thesis: A Theoretical Study on Optical High-Order Harmonic Generation in Three Matter Models*, (Universitat Autònoma de Barcelona, 1993).

- [90] F. Gauthey, *Thèse de Doctorat: Modélisation théorique de la réponse d'un atome soumis à un champ laser très intense à l'aide de systèmes simples*, (Université Paris 6, 1996).
- [91] J. B. Watson, A. Sanpera, X. Chen y K. Burnett, *Phys. Rev. A* **53**, R1962 (1996).
- [92] A. Sanpera, J. B. Watson, M. Lewenstein y K. Burnett, *Phys. Rev. A* **54**, 4320 (1996).
- [93] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling y B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).
- [94] V. P. Krainov y Z. S. Mulyukov, *Laser Phys.* **4**, 544 (1994).
- [95] E. Conejero Jarque y L. Plaja, *J. Opt. Soc. Am. B* **13**, 2724 (1996).
- [96] E. Conejero Jarque y L. Plaja, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **31**, 1687 (1998).
- [97] M. Protopapas, D. G. Lappas, C. H. Keitel y P. L. Knight, *Phys. Rev. A* **53**, R2933 (1996).
- [98] J. B. Watson, A. Sanpera, K. Burnett y P. L. Knight, *Phys. Rev. A* **55**, 1224 (1997).
- [99] D. Richards, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29**, 2925 (1996).
- [100] W. Becker, S. Long y J. K. McIver, *Phys. Rev. A* **50**, 1540 (1994).
- [101] C. K. Birdsall y A. B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation*, Plasma Physics Series (IOP Publishing, Bristol, 1991).



- [102] J. M. Dawson, *Rev. Mod. Phys.* **55**, 403 (1983).
- [103] *Proceedings of the 16th International Conference on the Numerical Simulation of Plasmas*, editado por V. Decyk (Santa Barbara, 1998).
- [104] L. Plaja y E. Conejero Jarque, aceptado en *Phys. Rev. E*.
- [105] L. D. Landau y E. M. Lifshitz, *Teoría Clásica de los Campos*, (Reverté, Barcelona, 1981).
- [106] K. Huang, *Statistical Mechanics*, (John Wiley and Sons, New York, 1987).
- [107] S. C. Rae y K. Burnett, *Phys. Rev. A* **46**, 1084 (1992).
- [108] K. L. Bell, H. B. Gilbody, J. G. Hughes, A. E. Kingston y F. J. Smith, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **12**, 891 (1983).
- [109] M. A. Lennon, K. L. Bell, H. B. Gilbody, J. G. Hughes, A. E. Kingston, M. J. Murray y F. J. Smith, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **17**, 1285 (1988).
- [110] B. M. Penetrante, J. N. Bardsley, W. M. Wood, C. W. Siders y M. C. Downer, *J. Opt. Soc. Am. B* **9**, 2032 (1992).
- [111] G. J. Pert, *Phys. Rev. E* **51**, 4778 (1995).
- [112] F. Brunel, *J. Opt. Soc. Am. B* **4**, 521 (1990).
- [113] S. C. Rae y K. Burnett, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26**, 1509 (1993).
- [114] V. Malyshev, E. Conejero Jarque y L. Roso, *J. Opt. Soc. Am. B* **14**, 163 (1997).
- [115] E. Conejero Jarque, V. Malyshev y L. Roso, *J. Mod. Opt.* **44**, 563 (1997).
- [116] A. Bendib, A. Tahraoui, K. Kalache, P. Chessa y P. Mora, *Opt. Commun.* **142**, 146 (1997).

- [117] W. P. Leemans, C. E. Clayton, W. B. Mori, K. A. Marsh, P. K. Kaw, A. Dyson, C. Joshi y J. M. Wallace, *Phys. Rev. A* **46**, 1091 (1992).
- [118] E. Conejero Jarque y L. Plaja, enviado a publicación.
- [119] E. Yablonovitch, *Phys. Rev. A* **10**, 1888 (1974).
- [120] E. Yablonovitch, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 795 (1988).
- [121] E. V. Vanin, A. V. Kim, A. M. Sergeev y M. C. Downer, *JETP Lett.* **58**, 900 (1993).
- [122] W. M. Wood, G. Focht y M. C. Downer, *Opt. Lett.* **13**, 984 (1988).
- [123] W. M. Wood, C. W. Siders y M. C. Downer, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3523 (1991).
- [124] C. W. Siders, N. C. Turner III, M. C. Downer, A. Babine, A. Stepanov y A. M. Sergeev, *J. Opt. Soc. Am. B* **13**, 330 (1996).
- [125] S. C. Wilks, J. M. Dawson y W. B. Mori, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 337 (1988).
- [126] W. B. Mori, *Phys. Rev. A* **44**, 5118 (1991).
- [127] R. L. Savage Jr., C. Joshi y W. B. Mori, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 946 (1992).
- [128] E. Conejero Jarque y L. Plaja, enviado a publicación.
- [129] R. Lichters y J. Meyer-ter-Vehn, en *Multiphoton Processes 1996*, editado por P. Lambropoulos y H. Walther (IOP Publishing, London, 1997).
- [130] W. Theobald, R. Häßner, C. Wülker y R. Sauerbrey, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 298 (1996).

- [131] D. Giulietti, L. A. Gizzi, A. Giulietti, A. Macchi, D. Teychenné, P. Chessa, A. Rousse, G. Cheriaux, J. P. Chambaret y G. Darpentigny, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3194 (1997).
- [132] J. Fuchs, J. C. Adams, F. Aminaroff, S. D. Baton, P. Gallant, L. Gremillet, A. Héron, J. C. Kieffer, G. Laval, G. Malka, J. L. Miquel, P. Mora, H. Pépin y C. Rosseaux, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2326 (1998).