



# Modellierung und Validierung von Feldionisation in parallelen Particle-in-Cell-Codes

Master-Arbeit  
zur Erlangung des Hochschulgrades  
Master of Science  
im Master-Studiengang Physik

vorgelegt von

MARCO GARTEN  
geboren am 24.09.1990 in Wolfen

Institut für Kern- und Teilchenphysik  
Fachrichtung Physik  
Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften  
Technische Universität Dresden

Abt. Laser-Teilchenbeschleunigung  
Institut für Strahlenphysik  
Helmholtz-Zentrum Dresden - Rossendorf  
2015

Eingereicht am 12. November 2015

1. Gutachter: Prof. Dr. Thomas Cowan
2. Gutachter: Prof. Dr. Ulrich Schramm

## Abstract

The modelling of field ionization in particle-in-cell(PIC) codes is an important prerequisite to analyzing high-power laser-matter interaction. Many field ionization models exist that have predictive capability at non-relativistic laser intensities and for laser pulse durations much longer than atomic time scales. Additionally many PIC codes exist which are operating on large CPU machines and already take field ionization into account. This thesis will take a step to model field ionization on new, highly parallel GPU architectures. Recently these architectures are increasingly applied to large scale scientific simulations for their raw computing power. The modelling of field ionization on GPGPUs proves to be challenging on GPGPUs and the extended aim of this thesis is employ techniques to verify that implementation. Difficulties in abiding by the constrains of the models themselves, the PIC algorithm as well as the plasma dynamics will be pointed out. Nevertheless PIConGPU, the fastest fully relativistic particle-in-cell code in existence, now provides an ionization framework by which new and exiting physical problems can be tackled.

## Zusammenfassung

Die Modellierung von Feldionisation in Particle-in-Cell(PIC)-Codes ist eine wichtige Voraussetzung zur Untersuchung der Wechselwirkung hochintensiver, ultrakurzer Laserpulse mit Materie. Es existieren bereits zahlreiche Modelle, die akkurate Vorhersagen im Bereich nicht-relativistischer Intensitäten und oberhalb atomarer Zeitskalen treffen können. Weiterhin existieren auch zahlreiche PIC-Codes, die für den Einsatz auf CPUs konzipiert wurden und Feldionisation berücksichtigen. Das Ziel dieser Arbeit ist die Modellierung von Feldionisation auf neuen, hochparallelen GPU-Architekturen. Diese werden in den letzten Jahren verstärkt für wissenschaftliche Simulationen eingesetzt und bieten einen deutlichen Geschwindigkeitsvorteil gegenüber CPUs. Die Modellierung von Feldionisation auf GPGPUs birgt einige Herausforderungen und es ist das erweiterte Ziel dieser Arbeit, die Implementierung auch zu verifizieren. Dabei wird ein Einblick in die Schwierigkeiten gegeben, die bei der Anwendung existierender Ionisationsmodelle durch Einschränkungen der Modelle selbst, des PIC-Schemas sowie der Plasmadynamik zu beachten sind. In Folge dieser Arbeit wurde PIConGPU, der derzeit schnellste, vollständig relativistische Particle-in-Cell-Code der Welt, um ein allgemeines Werkzeug zur Modellierung von Ionisation erweitert. Dieses ermöglicht die Simulation neuer und spannender physikalischer Anwendungsfälle im Bereich der Laser-Plasmaphysik.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Motivation</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>5</b>
3.1	Atomares Einheitensystem . . . . .	5
3.2	Ionisationsmechanismen . . . . .	7
3.2.1	Überblick und Eingrenzung der zu modellierenden Effekte . . . . .	7
3.2.2	Feldionisation . . . . .	10
	Unterdrückung der Potentialbarriere . . . . .	10
	Tunnelionisation . . . . .	11
3.3	Feldionisationsmodelle . . . . .	12
3.3.1	Überblick über bestehende Modelle . . . . .	12
3.3.2	Klassisches BSI-Modell . . . . .	13
3.3.3	Ammosov-Delone-Krainov-Tunnelionisationsmodell . . . . .	16
	Gültigkeitsbereich des Modells . . . . .	17
3.3.4	Vergleich und maßgebliche Größen für die Implementation . . . . .	19
3.3.5	Übergang von Ionisationswahrscheinlichkeit zu Ionisationsrate . . . . .	19
3.4	Beispiel zur Einordnung von Längen- und Zeitskalen des Ionisationsprozesses .	21
3.5	Begriffserklärung: Verifikation und Validierung . . . . .	23
<b>4</b>	<b>Implementation</b>	<b>25</b>
4.1	Kinetische Plasmasimulationen: der PIC-Algorithmus . . . . .	25
4.1.1	Einschränkungen an Simulationsgrößen durch den PIC-Algorithmus . .	27
4.2	Einbindung von Ionisation in das PIC-Schema . . . . .	28
4.2.1	Vorgaben an die Auflösung bedingt durch Plasmaparameter . . . . .	29
4.2.2	Skalenvergleich PIC-Schema und Ionisationsprozess . . . . .	30
4.2.3	Vorhersage der Ladungszustandsverteilung durch Markov-Ketten . . . .	33
4.3	PIC-Simulationen auf parallelen Vielkern-Architekturen . . . . .	36
4.3.1	Herausforderungen an die Implementation von Ionisation auf GPU . . .	36
	Teilchenerzeugung während der Laufzeit . . . . .	37

Monte-Carlo-Prozesse und Seeding . . . . .	37
4.4 Ionisations-Framework in PIconGPU . . . . .	38
4.4.1 PIconGPU . . . . .	38
Mächtigkeit des Spezies-Konzepts . . . . .	39
4.4.2 Ablauf der Ionisation während eines Simulationsschritts . . . . .	39
4.4.3 Vorteile und Erweiterbarkeit des geschaffenen Frameworks . . . . .	44
Verwendung verschiedener Modelle bei unterschiedlichen Spezies . . . . .	44
Kombination mehrerer Ionisationsmodelle . . . . .	44
4.5 Methodik zur Verifikation der Implementierung . . . . .	44
4.5.1 Zeitabhängigkeit des Ionisationsgrades bei konstanter elektrischer Feldstärke . . . . .	45
4.5.2 Signifikanztest der Verteilung um den Erwartungswert . . . . .	48
4.5.3 E-Feld-Abhängigkeit der Ionisationsrate . . . . .	50
4.5.4 Ladungszustandsverteilung bei linear wachsendem E-Feld . . . . .	51
4.5.5 Ladungszustandsverteilung bei exponentiell wachsendem E-Feld . . . . .	52
4.5.6 Überblick über Szenarien und Testparameter . . . . .	53
<b>5 Ergebnisse und Interpretation</b>	<b>55</b>
5.1 Zeitabhängigkeit des Ionisationsgrades von Wasserstoff . . . . .	55
5.1.1 Konsequenz in Bezug auf die Wahrscheinlichkeitsberechnung . . . . .	57
5.2 Entdeckung von Artefakten durch fehlerhaftes Seeding . . . . .	58
5.3 Signifikanztest auf Binomialverteilung . . . . .	60
5.3.1 Interpretation des Signifikanztests . . . . .	65
5.4 E-Feld-Abhängigkeit der Ionisationsrate . . . . .	66
5.5 Ladungszustandsverteilung bei linear wachsendem E-Feld . . . . .	70
5.5.1 Fazit für Abtastung des E-Feldes . . . . .	72
5.6 Ladungszustandsverteilung bei exponentiell wachsendem E-Feld . . . . .	73
5.6.1 Notwendigkeit für Subsampling . . . . .	78
<b>6 Zusammenfassung</b>	<b>79</b>
6.1 Anwendungsfälle der bestehenden Implementation . . . . .	79
<b>7 Ausblick</b>	<b>81</b>
7.1 Offene Fragen und Lösungsansätze . . . . .	81
7.1.1 Vorschläge zur Verbesserung der Modellierung von Feldionisation . . . . .	81
7.1.2 Weitere Tests zur Verifikation . . . . .	82
7.1.3 Möglichkeiten der Validierung . . . . .	83
7.2 Relevante Anwendungsfälle . . . . .	83

**8 Literaturverzeichnis**



# 1 Motivation

Particle-in-Cell (PIC) Codes sind wichtige Werkzeuge zur Simulation von Laser-Teilchen-Wechselwirkung. Hochparallele Prozessorarchitekturen bieten das Potential noch größere Probleme in kürzerer Zeit als bisher zu lösen. Innerhalb der letzten Jahre sind wurde erreicht, Laserpulse mit relativistischen Spitzen-Intensitäten und Pulsdauern unterhalb des Femtosekunden-Bereichs zu produzieren. Eine Eigenschaft solcher Pulse sind große Intensitätsgradienten in Zeit und Raum. Das wirft die Frage auf, ob existierende Feldionisationsmodelle auf hochparallelen GPU-Architekturen implementiert und wie gut sie zur Beschreibung der Prozesse verwendet werden können. Dazu sollen eine allgemeine Rahmenstruktur sowie häufig verwendete Modelle zur Feldionisation in den Code *PICongPU* implementiert werden. Das Ziel dieser Arbeit besteht darin, diese Implementation anhand des ADK-Tunnelmodells zu verifizieren und auf Grenzen der Anwendbarkeit mit Ausblick auf Lösungsstrategien zu prüfen.

---

**Abkürzungs- und Fremdwortverzeichnis**


---

ADK	<i>Ammosov-Delone-Krainov</i>	Namensgeber eines weit verbr. Tunnelionisationsmodells
AU	<i>atomic units</i>	Atomare Einheiten
BSI	<i>Barrier-Suppression-Ionisation</i>	Ionisation durch Absenkung der Potentialbarriere des Atoms
EM	<i>electromagnetic</i>	elektromagnetisch
GPU	<i>graphics processing unit</i>	Grafikprozessor-Einheit
HPC	<i>high performance computing</i>	Hochleistungsrechnen
$I_{\text{app}}$	<i>appearance intensity</i>	Schein-Intensität
PIC	<i>Particle-In-Cell</i>	kinetisches Modell zur Beschreibung von Plasmen
PIConGPU	<i>Particle-in-Cell on Graphics Processing Units</i>	PIC Code auf GPUs der Gruppe für Computergestützte Laser-Teilchen-Beschleunigung des HZDR
RNG	<i>random number generator</i>	Zufallszahl-Generator

---

**Tabelle 1.1:** Abkürzungs- und Fremdwortverzeichnis.

## 2 Einleitung

Diese Masterarbeit stellt die Implementation eines allgemeinen Frameworks zur Feldionisation und dessen Verifikation an einem häufig verwendeten Tunnelionisationsmodell in den Mittelpunkt. Dabei sollen Möglichkeiten zur Anwendung im Hinblick auf Laser-Materie-Wechselwirkung mit ultrakurzen hochintensiven Laserpulsen besprochen, aber auch Grenzen der Anwendbarkeit aufgezeigt werden. Zu Beginn wird das Atomare Einheitensystem eingeführt und physikalische Effekte sowie konzeptuelle Modelle zur Beschreibung der Feldionisation werden erklärt. Im Anschluss wird detailliert beschrieben, wie das Framework für Ionisation in PIConGPU, dem vollständig relativistischen PIC-Code der Abteilung für Computergestützte Laser-Teilchenbeschleunigung des Instituts für Strahlenphysik am HZDR, implementiert wurde. Anschließend werden Teststrategien zur Verifikation dieser Implementation am bekannten ADK-Tunnelionisationsmodell motiviert und erläutert. Resultate der durchgeführten Tests werden gezeigt und die Anwendbarkeit der Implementation dadurch bestätigt. Diese Masterarbeit wird zusammengefasst mit einer Einschätzung über die nun möglichen Anwendungsfälle des Codes. Außerdem werden Grenzen der der Anwendbarkeit aufgezeigt. Zuletzt wird ein Ausblick gegeben, der nächste Schritte zur weiteren Verifikation und Validierung sowie Verbesserungen in der Modellierung von Feldionisation vorschlägt.



# 3 Theoretische Grundlagen

Die zentrale Frage dieser Arbeit ist: *Wie gut kann Feldionisation in hochparallelen PIC Codes modelliert werden und was sind die Grenzen der Genauigkeit?* Aus diesem Grund beschäftigt sich der Theorieteil dieser Arbeit mit den grundlegenden Ionisationsprozessen und genauer mit der Feldionisation. Er soll ein Gefühl für die maßgeblichen Größenordnungen der betrachteten Physikparameter geben und das zu modellierende System genauer beschreiben. Um die Intuitivität der die Prozesse beschreibenden Formeln zu erhöhen, sind sie hier im System atomarer Einheiten vorzufinden.

## 3.1 Atomares Einheitensystem

Das atomare Einheitensystem ist über maßgebliche Längen-, Zeit- und Energieskalen im Wasserstoffatom definiert und ermöglicht so eine intuitivere Vorstellung des physikalischen Systems, sofern es aus Atomen besteht oder die Interaktion mit diesen beschreibt. Da alle physikalischen Parameter in Verhältnissen ausgedrückt werden, wird die Komplexität der Formeln deutlich reduziert. Eine detaillierte Herleitung und Beschreibung zur Konversion zwischen den Einheitensystemen ist in Ref. [18] zu finden.

1 AU	entspricht	in SI Einheiten	Phys. Bedeutung
Masse	$m_e$	$9\,1094 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$	Elektronmasse
Länge	$\frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{e^2 m_3} = a_0$	$0\,5292 \cdot 10^{-10} \text{ m}$	1. Bohr-Radius (H)
Zeit	$\frac{\hbar^3 (4\pi\epsilon_0)^2}{m_e e^4}$	$2\,4189 \cdot 10^{-17} \text{ s}$	$\approx \frac{150 \text{ as}}{2\pi}$ , klassische $e^-$ -Orbit Periode (H) dividiert durch $2\pi$
Ladung	$e$	$1\,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	Elementarladung
Wirkung	$\hbar$	$1\,0546 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$	Drehimpuls-Quant
Permittivität	$4\pi\epsilon_0$	$4\pi \cdot 8\,8542 \cdot 10^{-12} \frac{\text{C}}{\text{Vm}}$	Coulomb-Konstante
Energie	$\frac{m_e e^4}{\hbar^2 (4\pi\epsilon_0)^2}$	$4\,3598 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 27\,21 \text{ eV}$	2 Rydberg = 2 x H Bindungsenergie im Grundzustand
Geschwindigkeit	$\frac{e^2}{\hbar 4\pi\epsilon_0}$	$2\,1877 \cdot 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}} = \alpha c$	in AU entspricht die Lichtgeschwindigkeit der inversen Feinstrukturkonstante ( $\alpha \approx 1/137$ )
El. Feld	$\frac{m_e^2 e^5}{\hbar^4 (4\pi\epsilon_0)^3}$	$5\,1422 \cdot 10^{11} \frac{\text{V}}{\text{m}}$	Klassisches E-Feld zur Unterdrückung der Potentialbarriere im H-Atom
Magn. Flussdichte	$\frac{m_e^2 e^3}{\hbar^3 (4\pi\epsilon_0)^2}$	$2\,3505 \text{ T}$	Betrag der M.F. im Zentrum des H-Atoms unter Annahme eines klass. Elektronen-Orbits
Intensität	$\frac{m_e^4 e^{12}}{8\pi\alpha\hbar^9 (4\pi\epsilon_0)^6}$	$3\,5095 \cdot 10^{16} \frac{\text{W}}{\text{cm}^2}$	“Schein-Intensität” für H-Ionisation

**Tabelle 3.1:** Am häufigsten verwendete atomare Einheiten und ihre physikalische Bedeutung. Zusätzliche Umrechnungsfaktoren ins SI System wurden ebenfalls aufgeführt.

## 3.2 Ionisationsmechanismen

Im Folgenden werden die verschiedenen Effekte, die zur Ionisation eines Atoms führen können kurz benannt und eingegrenzt welche für diese Masterarbeit zu modellieren waren.

Im Anschluss folgt eine Beschreibung der konzeptuellen Modelle, die zur Implementation ausgewählt wurden und der Bereich ihrer Anwendbarkeit wird diskutiert.

Zuletzt soll mithilfe einer Abschätzung über die maßgeblichen Längen-, Zeit- und Energieskalen an einem Beispielsystem motiviert werden, wie Feldionisation implementiert wurde und wie diese Implementation verifiziert werden kann.

### 3.2.1 Überblick und Eingrenzung der zu modellierenden Effekte

Ein Elektron verlässt die Atomhülle zumeist unter Einwirkung eines externen elektromagnetischen Feldes. Dieses kann sowohl durch elektromagnetische Wellen, als auch durch ein externes Potential (beispielsweise durch geladene Teilchen). Man unterscheidet daher für gewöhnlich:

---

#### Photoionisation

---

Einzelphoton-Ionisation  
 Multiphoton-Ionisation

---

#### Feldionisation

---

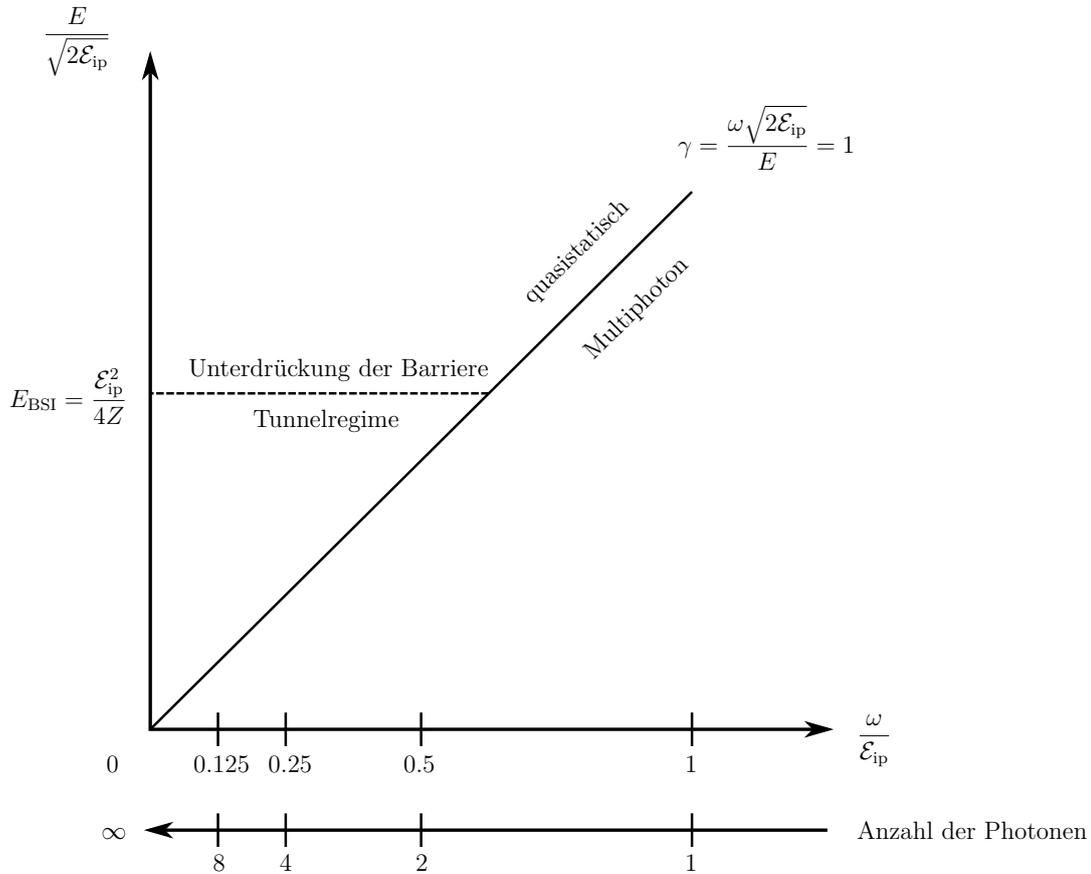
Tunnelionisation  
 Unterdrückung der Ionisationsbarriere (BSI)  
 Ionisation durch Strahlungsdruck

---

#### Stoßionisation

---

**Tabelle 3.2:** Übersicht über verschiedene Ionisationsprozesse. Eine Kurzbeschreibung jedes der genannten Effekte liefert [32]



**Abbildung 3.1:** Schematische Einteilung der Regimes verschiedener Ionisationseffekte nach der Keldysh-Theorie [13]. Der Keldysh-Parameter  $\gamma$  bestimmt den Übergang zwischen Feld- und Multiphoton-Ionisation. Er kann auch als das Verhältnis zwischen Laserfrequenz und Tunnelfrequenz interpretiert werden. Innerhalb des Bereichs der quasistatischen Feldionisation markiert die atomspezifische BSI-Feldstärke die Grenze zwischen dem quantenmechanischen Tunnelregime und der klassischen Unterdrückung der Potentialbarriere.

Die Keldysh-Theorie [13] liefert ein Modell zur Einordnung der Ionisationseffekte in Fig. 3.1. Um den dominierenden Effekt zu bestimmen, sind folgende Größen ausschlaggebend:

- **Atomparameter**

- Kernladungszahl  $Z$

*Anzahl der Protonen im Atomkern*

- Ionisationspotential  $\mathcal{E}$

*Beschreibt die Stärke der Bindung des Elektrons an das Coulombpotential des Kerns.*

- Quantenzahlen

*Dienen der Beschreibung der Orbitalstruktur in der Atomhülle, von der sich die Stärke des Ionisationspotentials ableiten lässt.*

- \* Hauptquantenzahl  $n$
- \* Bahndrehimpulsquantenzahl  $l$
- \* magnetische Orientierungsquantenzahl  $m_l$
- \* magnetische Spinquantenzahl  $m_s$

- **Parameter des externen elektromagnetischen Feldes**

- Photonenenergie und Kreisfrequenz  $\omega$   
*Beschreibt die Energie, die ein einzelnes Photon aus dem elektromagnetischen Feld mit sich trägt. Ist diese groß gegenüber dem Ionisationspotential  $\mathcal{E}$ , so dominiert Einzelphotonen-Ionisation. Ist die Energie klein gegenüber  $\mathcal{E}$ , aber die Kreisfrequenz  $\omega$  groß gegenüber der Umlauffrequenz des Elektrons im Orbital, so dominiert Multiphoton-Ionisation.*
- Periode des EM-Felds  $T = \frac{2\pi}{\omega}$   
*Dient der Einschätzung, ob das elektromagnetische Feld des Lasers gegenüber Zeitskalen der Elektronendynamik in der Atomhülle (etwa  $10^{-18}$  s) schnell oder langsam variiert.*
- Feldstärke  $\vec{E}(t)$   
*Ist die elektrische Feldstärke des Lasers von etwa der gleichen Größenordnung wie die Feldstärke zwischen Atomkern und Elektron und variiert das externe Feld außerdem langsam gegenüber den Zeitskalen der Elektronendynamik, so dominiert Feldionisation.*
- Magnetische Flussdichte  $\vec{B}$   
*Beschreibt die Stärke der Magnetfeldkomponente des externen elektromagnetischen Feldes. Diese Komponente kann an die magnetischen Momente der Elektronen in der Atomhülle koppeln und eine Änderung des Ionisationspotentials hervorrufen.*
- Polarisationsrichtung  
*Beschreibt den Richtungsvektor, dem die Schwingung der Amplitude der elektromagnetischen Welle folgt. Die Polarisation beeinflusst wie sich das Elektron unter Einfluss des externen Feldes bewegt.*

- **Abgeleitete Parameter für das später freie Elektron**

- Ponderomotives Potential  $U_P = \frac{E^2}{4\omega^2}$   
*Beschreibt die Stärke der Oszillationsbewegung eines freien Elektrons in einem elektromagnetischen Wechselfeld.*

In dieser Arbeit soll das Hauptaugenmerk auf die Modellierung von Feldionisation mit Fokus auf Tunnelionisation und die Unterdrückung der Potentialbarriere gelegt werden.

### 3.2.2 Feldionisation

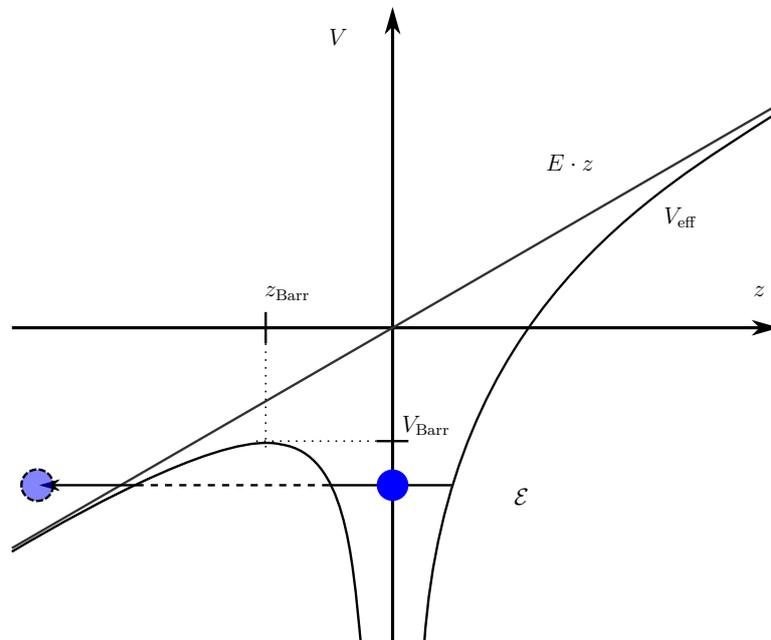
Die Prozesse der Feldionisation dominieren, wenn die Photonenenergie  $\omega$  klein gegenüber der Bindungsenergie  $\mathcal{E}$  des Elektrons an das Atom ist und wenn das äußere elektrische Feld  $E$  stark genug ist, das bindende Coulombpotential des Atoms in seiner Form zu verändern.

#### Unterdrückung der Potentialbarriere

Ein klassisches Bild für Feldionisation ist die Unterdrückung der Potentialbarriere, kurz *BSI* (*barrier suppression ionization*) [18]. Hierbei befindet sich das Atom in einem *quasistatischen* elektrischen Feld (siehe Abb. 3.3). Die Feldstärke  $E$  induziert ein Potential  $V_{\text{ext}} = Ez$ , welches die Form des atomaren Bindungspotentials verändert. Das Coulombpotential des Atomkerns wird durch  $V_{\text{ext}}$  einseitig deutlich überhöht, während sich auf der entgegengesetzten Seite eine Barriere ausbildet. Es sei der Kontinuumszustand außerhalb des Atoms auf der Energie  $E = 0$  und der gebundene Zustand des Elektrons im Atom bei  $E = -\mathcal{E}$ . Ist das externe E-Feld nun so stark, dass das Maximum der Potentialbarriere auf  $V_{\text{Barr}} < \mathcal{E}$  ( $V_{\text{Barr}} < 0$ ) gesenkt wird, dann wird das Elektron nicht mehr an den Atomkern gebunden. Die elektrische Feldstärke die nötig ist, um die Barriere so weit zu unterdrücken, soll mit  $E_{\text{BSI}}$  bezeichnet werden.

Der klassische Ansatz vernachlässigt weitgehend die Orbitalstruktur des Atoms. Nichtsdestotrotz ist er von Bedeutung, da er sehr einfach zu berechnen und daher für erste Abschätzungen zum Auftreten von Ladungszuständen dienlich ist.

## Tunnelionisation



**Abbildung 3.2:** Atomares Bindungspotential unter Einfluss eines äußeren Potentials, vermittelt durch ein quasi-statisches elektrisches Laser-Feld  $\vec{E} = E_z$ . In einer Richtung weist das nun effektive Potential  $V_{\text{eff}}$  eine endlich hohe Barriere auf. Der Bindungszustand des Elektrons im Potentialtopf liegt energetisch höher als das Kontinuum außerhalb der Barriere. Daher existiert eine nicht-verschwindende Aufenthaltswahrscheinlichkeit für das Elektron außerhalb des Potentialtopfes und es kann durch die Barriere tunneln.

Die klassische Betrachtungsweise unterschätzt Ionisation unterhalb der Unterdrückungs-Feldstärke  $E_{\text{BSI}}$ , da für das Elektron auch eine Wahrscheinlichkeit besteht, quantenmechanisch durch die Barriere zu tunneln. Grund dafür ist, dass durch die endlich hohe Barriere auf einer Seite des Potentials keine scharfen Bindungszustände mehr existieren und daher das Elektron auch außerhalb der Barriere eine nicht-verschwindende Aufenthaltswahrscheinlichkeit erhält. Diese Wahrscheinlichkeit kann durchaus so beträchtlich sein, dass ein Zustand bereits deutlich vor Erreichen der BSI-Feldstärke ionisiert wird. Das Bild der Tunnelionisation geht wie das klassische Bild zuvor von einem starken *quasistatischen* externen elektrischen Feld aus. Der eigentliche Tunnelprozess wird als *quasi-instantan* angenommen. Die obere Grenze an die Dauer des Tunnelprozesses wird abgeschätzt durch eine atomare Zeiteinheit. Diese beschreibt die Orbitperiode des Elektrons im Wasserstoff, geteilt durch  $2\pi$ . Diese Zeitdauer ist geringer als typische Perioden der Laser-Welle eines Infrarot-Lasers.

### 3.3 Feldionisationsmodelle

Der folgende Abschnitt dient dazu, einen Überblick über bisher entwickelte Feldionisationsmodelle zu geben und zu motivieren, welche Modelle für die Implementation während der Arbeit ausgewählt wurden. Eine Untersuchung wurde im Detail in einer früheren Arbeit des Autors [8] durchgeführt.

#### 3.3.1 Überblick über bestehende Modelle

- **Unterdrückung der Potentialbarriere**
  - approx. BSI-Modell [18]  
*Verwendet einfache Approximationen an das Bindungspotential des Atoms und berechnet daraus das notwendige  $F_{\text{BSI}}$*
  - empirisches BSI-Modell  
*Nutzt empirisch ermittelte Daten zur Bestimmung von  $F_{\text{BSI}}$*
- **Tunnelionisation**
  - **TDSE / TDDE** [29]  
*Numerische Berechnung von Ionisationswahrscheinlichkeiten mit zeitabhängiger Schrödinger-Gleichung bzw. zeitabhängiger Dirac- Gleichung*
  - **Landau-Lifshitz (1958)** [16]
  - **Keldysh-Theorie (1965)** [13]
  - **Popov-Perelomov-Terent'ev (1966)** [22]
  - **Ammosov-Delone-Krainov (1986)** [1]
  - **cADK** [28]  
*Sammelbegriff "corrected ADK"*  
*Im Anschluss an die Theorie von Ammosov, Delone und Krainov wurde das Modell durch mehrere Autoren auf Grundlage von experimentellen Daten und theoretischen Rechnungen für spezielle Anwendungsfälle erweitert*
  - **BSIe ADK (1997)** [15]  
*Erweiterung des ADK-Modells durch Krainov in das Regime der Unterdrückung der Potentialbarriere*
  - **Yudin-Ivanov (2001)** [37]  
*Tunnelionisationsmodell orientiert an der Keldysh-Theorie, basierend auf der SFA (Starkfeld-Approximation) [25], welches Ionisationsraten als Funktion der momentanen Laser-Phase liefert.*

Für die erste Implementation von Feldionisation wurde das BSI-Modell ausgewählt. Es ist einfach zu implementieren, da es ausschließlich die Beachtung der BSI-Feldstärke erfordert. Da dieses Modell bei Überschreiten von  $E_{\text{BSI}}$  eine instantane Ionisation voraussagt, ist auch leicht zu überprüfen, ob die erwartete Anzahl von Ionisationsprozessen stattgefunden hat und ob in der Simulation die richtige Anzahl Teilchen erzeugt wurde. Außerdem erlaubt dieses Modell sehr leicht, eine Vorhersage über die zu erwartende Ladungsverteilung zu treffen.

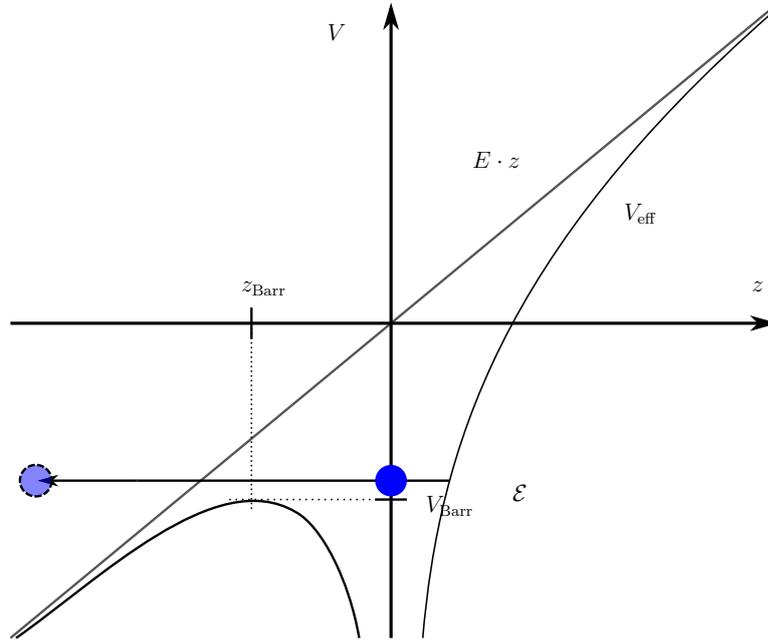
Im Laufe dieser Arbeit wurde auch ein weiteres Ionisationsmodell implementiert, welches von höherer Komplexität als das BSI-Modell ist.

Aufgrund der weiten Verbreitung und Anwendung in der Erforschung der Wechselwirkung starker Laserfelder mit Materie, sowie der Adaption in mehrere Particle-in-Cell-Codes wurde zur Implementation das ADK Tunnelionisations-Modell gewählt. Das ADK-Modell wurde seit seiner Veröffentlichung mehrfach modifiziert. Speziell in dieser Arbeit wurde eine durch Delone und Krainov [5] vereinfachte Variante gewählt, da sie die Orbitalstruktur des Atoms auf eine einzelne effektive Quantenzahl  $n^*$  approximiert. Tunnelionisation ist für Titan-Saphir(Ti:Sa)-Hochleistungs-Lasersysteme neben BSI der dominierende Ionisationseffekt, da die Wellenlänge dieser Systeme im Infrarot-Bereich liegt. Ti:Sa-Laser finden eine breite Anwendung in der Plasmaphysik und daher ist die Modellierung von Tunnelionisation von großem praktischen Interesse.

### 3.3.2 Klassisches BSI-Modell

Im einfachsten klassischen Feldionisations-Modell (siehe Punkt 3.2.2 und [18]) befindet sich das jeweils äußerste Elektron in einem gebundenen Zustand des  $(-1/r)$ -Coulombpotentials des Atomkerns. Dabei werden Abschirmungseffekte der anderen Elektronen und jegliche Substruktur des Atoms vernachlässigt. Das Atom wird innerhalb eines externen Potentials  $V_{\text{ext}}$  betrachtet, welches die Radialsymmetrie des Coulombpotentials bricht. Das neue *effektive Potential* lässt sich darstellen, als:

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{Atom}} + V_{\text{ext}} V_{\text{eff}} = -\frac{Z}{r} + Ez \quad (3.1)$$



**Abbildung 3.3:** Schematische Repräsentation der Ionisation durch Unterdrückung der Potentialbarriere (BSI). Das atomare Bindungspotential wird durch ein äußeres Potential, vermittelt durch ein quasi-statisches elektrisches Feld  $\vec{E} = E_z$  in seiner Form verändert. Das resultierende effektive Potential  $V_{\text{eff}}$  ist einseitig stark überhöht. Die Höhe der Potentialbarriere  $V_{\text{Barr}}$  an der Position  $z_{\text{Barr}}$  befindet sich unterhalb des Energieniveaus  $\mathcal{E}$  des Elektrons. Es ist damit nicht mehr an den Atomkern gebunden.

Wie in Abb. 3.3 zu sehen, ist das Atompotential durch das externe Potential auf der rechten Seite überhöht, während sich auf der gegenüberliegenden Seite eine *endlich hohe* Potentialbarriere gebildet hat. Die  $z$ -Dimension ist so gewählt, dass sie parallel zum Vektor des E-Felds  $\vec{E}$  liegt. Die Höhe der Barriere  $V_{\text{Barr}}$  lässt sich wie folgt bestimmen.

$$\frac{\partial}{\partial z} (V_{\text{eff}}) = \frac{\partial}{\partial z} \left( -\frac{Z}{|z|} + Ez \right) \quad (3.2)$$

$$= +\frac{Z}{z^2} + E \stackrel{!}{=} 0 \quad (3.3)$$

$$z_{\text{Barr}} = -\sqrt{\frac{Z}{E}} \quad (3.4)$$

$$\text{und somit } V_{\text{Barr}} = -2\sqrt{ZE} \quad (3.5)$$

Die Annahmen des BSI-Modells gelten in guter Näherung für Wasserstoff und wasserstoffähnliche Ionen. Das sind Ionen, die nur noch ein Außenelektron im  $1s$ -Zustand besitzen. Bei diesen sind die Bindungsenergien  $\mathcal{E}$  [9] näherungsweise gegeben durch:

$$\mathcal{E}_n = -\frac{Z^2}{2n^2}, \quad \text{insbesondere für den Grundzustand : } \mathcal{E} = -\frac{Z^2}{2} \stackrel{!}{=} -2\sqrt{ZE_{\text{crit}}} \quad (3.6)$$

Im Folgenden wird die kritische elektrische Feldstärke aus Glg. 3.6 der bereits erwähnten Größe  $E_{\text{BSI}}$  gleichgesetzt. Um das Modell für diese Arbeit auch auf nicht-wasserstoffähnliche Ionen anzuwenden, wird für das Ionisationspotential  $\mathcal{E}$  der tabellierte Wert  $\mathcal{E}_{\text{tab}}$  [19] für den jeweiligen Ladungszustand eingesetzt.

$$E_{\text{crit}} \equiv E_{\text{BSI}} = \frac{\mathcal{E}_{\text{tab}}^2}{4Z}. \quad (3.7)$$

Mit dieser Annahme lässt sich leicht für jeden Ladungszustand eine *Schein-Intensität*  $I_{\text{app}}$  angeben, die einen Richtwert darstellt, bei welcher Intensität mit dem Auftreten des nächsthöheren Ladungszustand zu rechnen ist.

$$I_{\text{app}} = \frac{\mathcal{E}_{\text{tab}}^4}{16Z^2}. \quad (3.8)$$

Nach Bauer [2] existiert ein weiterer Ausdruck für das elektrische Feld, welches zur Unterdrückung der Potentialbarriere nötig ist. Dieser Ansatz berücksichtigt zusätzlich noch den linearen Stark-Effekt [6], der durch Kopplung des externen elektrischen Felds  $\vec{E}$  an das permanente Dipolmoment  $\vec{p}$  in Wasserstoff und wasserstoffähnlichen Ionen den Wert der BSI-Feldstärke  $E_{\text{BSI}}$  erhöht.

$$E_{\text{crit}}^{\text{BM}} = (\sqrt{2} - 1)\mathcal{E}^{3/2} \quad (3.9)$$

Bauer und Mulser [3] nutzen  $E_{\text{crit}}^{\text{BM}}$  als Schwellwert für die Fortsetzung der verschiedenen Tunnelionisationsmodelle in das Regime der Unterdrückung der Potentialbarriere. Sie beschrieben weiterhin in [3], dass die häufig verwendeten Modelle für Tunnelionisation (ADK, Keldysh, ...) im Vergleich mit Ergebnissen aus numerischen TDSE-Rechnungen nicht übereinstimmen. Sie folgerten, dass diese Tunnelionisationsmodelle die Ionisationsrate im Bereich hoher Feldstärken nicht mehr gut beschreiben. Da Feldstärken von der Größenordnung  $E_{\text{crit}}$  die Höhe der Potentialbarriere  $V_{\text{Barr}}$  unter das Energieniveau des Elektrons absenken, muss die Barriere auch nicht mehr durch quantenmechanisches Tunneln überwunden werden. Bauer und Mulser entwickelten ein eigenes Modell aus einer grafischen Anpassung ausgehend von den bekannten Ionisationsraten an die numerisch ermittelten Ionisationsraten der TDSE-Lösung.

$$\Gamma_{\text{BM}}(t) = \begin{cases} \Gamma_{\text{Tunnel}}[E(t)] & \text{für } E(t) < E_{\text{crit}}^{\text{BM}} \\ 2,4/Z^4 \cdot E(t)^2 & \text{für } E(t) \geq E_{\text{crit}}^{\text{BM}} \end{cases} \quad (3.10)$$

Das Bauer-Mulser-Modell sieht vor, die erwähnten Tunnelmodelle nur unterhalb der Feldstärke  $E_{\text{crit}}^{\text{BM}}$  einzusetzen. Oberhalb von  $E_{\text{crit}}^{\text{BM}}$  werden die Ionisationsraten von  $2,4/Z^4 \cdot E(t)^2$  gut approximiert.

### 3.3.3 Ammosov-Delone-Krainov-Tunnelionsationsmodell

Auf Grundlage der Theorien von Landau und Lifshitz [16], Perelomov, Popov und Terent'ev [22] sowie der Klassifizierung der Ionisationsregimes nach Keldysh [13] veröffentlichten Ammosov, Delone und Krainov 1986 ein bis heute häufig zitiertes und verwendetes Tunnelionsationsmodell für komplexe Atome und Ionen [1]. Es existieren eine "Gleichstrom"(DC)- und eine "Wechselstrom"(AC)-Variante der Formel zur Berechnung der Ionisationsrate. Die Wechselstrom-Variante kann verwendet werden, wenn die Zeitskalen des betrachteten Prozesses um mehrere Größenordnungen länger sind, als die Periode des Lasers. Das AC-Modell wurde über mehrere Laser-Perioden gemittelt und die zugrunde liegende Schwingung des elektromagnetischen Feldes wird nicht aufgelöst. Jedoch hat die Arbeit von Chen et al. [4] gezeigt, dass für explizite Plasma-Simulationen mit Particle-in-Cell-Codes die Ergebnisse der DC-Variante näher an theoretischen Berechnungen der zu erwartenden Ionisationsrate liegen.

Im nächsten Kapitel dieser Arbeit (siehe Punkt 4.1.1) wird außerdem ersichtlich, dass der Verlauf des elektrischen Feldes innerhalb einer Wellenlänge mit mindestens 6 bis 12 Schritten abgetastet werden muss. Das ist nötig, um die Anforderungen des Particle-in-Cell-Algorithmus' an die Mindestauflösung der Längen- und Zeitskalen in der Simulation zu genügen.

Die Gleichstrom-ADK-Rate hat die Form

$$\Gamma_{\text{ADK}}^{\text{DC}} = C_{n^*l}^2 f(l, m) \mathcal{E} \left( \frac{3E}{\pi(2\mathcal{E})^{3/2}} \right)^{1/2} \left( \frac{2}{E} (2\mathcal{E})^{3/2} \right)^{2n^* - |m| - 1} \exp \left( -\frac{2(2\mathcal{E})^{3/2}}{3E} \right) \quad (3.11)$$

mit

$$C_{n^*l} = \left( \frac{2e}{n^*} \right)^{n^*} (2\pi n^*)^{-1/2}, \quad (3.12)$$

$$f(l, m) = \frac{(2l+1)(l+|m|)!}{2^{|m|} |m|! (l-|m|)!}. \quad (3.13)$$

Formel (3.11) führt die *effektive Hauptquantenzahl*  $n^*$  ein. Durch  $n^*$  wird berücksichtigt, dass die Innerschalen-Elektronen die Ladung des Atomkerns nicht vollständig abschirmen und die Hauptquantenzahl  $n$  um den *Quantendefekt* [5]  $\delta_n$  reduziert werden muss.

$$n^* = \frac{Z}{\sqrt{2\mathcal{E}}} \quad (3.14)$$

In der Herleitung von (3.11) wird das externe elektromagnetische Feld als *quasistatisches elektrisches Feld* approximiert. Das entspricht dem Limit  $\gamma = \frac{\omega\sqrt{2\mathcal{E}}}{E} \rightarrow 0$  in der Keldysh-Theorie (siehe Abb. 3.1).

Für die Implementation in dieser Arbeit wurde eine Form gewählt, die von Krainov [15] so vereinfacht wurde, dass die Abhängigkeit der Ionisationsrate von der komplexen Orbitalstruktur

des Atoms nur noch durch die effektive Hauptquantenzahl  $n^*$  repräsentiert wird.

$$\Gamma_{\text{ADK}} = \underbrace{\sqrt{\frac{3n^{*3}E}{\pi Z^3}}}_{\text{lin. pol.}} \frac{ED^2}{8\pi Z} \exp\left(-\frac{2Z^3}{3n^{*3}E}\right), \quad \text{mit } D = \left(\frac{4eZ^3}{En^{*4}}\right)^{n^*} \quad \text{und } n^* = \frac{Z}{\sqrt{2\mathcal{E}_{\text{tab}}}} \quad (3.15)$$

In dieser Arbeit wurde ausschließlich lineare Polarisation betrachtet. Der Vorfaktor in Gleichung (3.15) ist nur in diesem Fall vorhanden. Die Form für zirkulare Polarisation ist identisch, bis eben diesen Vorfaktor, der durch Mittelung über eine Laser-Periode erhalten wurde. Der Exponentialterm kann durch Einsetzen von  $n^*$  auf eine Form zurückgeführt werden, die identisch mit dem Exponentialterm der Ionisationsrate von Landau und Lifshitz [16] ist. Er beschreibt die Wahrscheinlichkeitsdichte für das gebundene Elektron außerhalb der Potentialbarriere.

$$\exp\left(-\frac{2Z^3}{3n^{*3}E}\right) = \exp\left(-\frac{2}{3} \frac{Z^3}{Z^3} \frac{(2\mathcal{E}_0)^{3/2}}{E}\right) = \exp\left(-\frac{2}{3} \frac{(2\mathcal{E}_0)^{3/2}}{E}\right), \quad (3.16)$$

Krainov formuliert im gleichen Artikel noch eine Variante 3.17, die das Modell auf den Bereich höherer Feldstärken zum BSI-Regime hin erweitert.

$$\Gamma_{\text{Kr}} = \frac{4\sqrt{3}}{\pi n^*} \frac{E}{(2E)^{1/3}} \left(\frac{4e\mathcal{E}^{3/2}}{En^*}\right)^{2n^*} \int_0^\infty \text{Ai}^2\left(x^2 + \frac{2\mathcal{E}}{(2E)^{3/2}}\right) x^2 dx \quad (3.17)$$

Formel 3.17 berücksichtigt im Gegensatz zu vielen früheren Ansätzen die Coulomb-Korrektur [24] auf die Wellenfunktion des freien Elektrons durch den Einfluss der Ladung des Kerns. Außerdem wird auch die Verschiebung der Ionisationspotentiale durch den Stark-Effekt beachtet. Trotz der Vorteile der BSI-Erweiterung durch Krainov wurde Formel 3.15 für die Implementation ausgewählt, um in einem zukünftigen Vergleich mit anderen Particle-in-Cell-Codes die Implementation verifizieren zu können. Abschnitt 4.4 wird allerdings zeigen, dass die Rahmenstruktur der Ionisation modellunabhängig implementiert wurde. Damit kann das Krainov-Modell im Anschluss an diese Arbeit leicht hinzugefügt werden. Eine ausführlichere Analyse dieses Modells wurde durch den Autor dieser Arbeit in [8] durchgeführt.

### Gültigkeitsbereich des Modells

Nach der Definition des Tunnelregimes durch Keldysh 3.1 wäre die Anwendung des Modells für alle  $\gamma < 1$  zulässig, also so lange, wie die Periode des Lasers länger ist als die Zeit des Tunnelprozesses. Es bestehen jedoch deutliche Unterschiede in den Ansichten verschiedener Autoren, ob eine reale Zeit für den Tunnelprozess existiert [17] oder nicht [23]. In Ermangelung einer eindeutigen Antwort auf diese Frage wird in dieser Arbeit die obere Grenze an die Zeitskala des Tunnelprozesses mit  $1 \text{ AU} = 2,4189 \cdot 10^{-17} \text{ s}$  angesetzt. Diese Wahl ist sinnvoll, da sie bereits als Zeitskala für die Elektronendynamik in (siehe Tabelle 3.1) identifiziert wurde.

Bauer und Mulser [3] stellten fest, dass die Ionisationsrate bei wachsender Feldstärke sogar wieder sinken kann. Das kann dadurch begründet werden, dass das ADK-Modell ausschließlich der Beschreibung von Tunnelionisation dient. Wird die Potentialbarriere vollständig unterdrückt (siehe Abb. 3.3, ist das Elektron bereits nicht mehr an den Kern gebunden und das ADK-Modell wird für die Beschreibung des Ionisationsprozesses unpassend. Daraus ergibt sich, dass das ADK-Modell nur für elektrische Feldstärken  $E(t) < E_{\text{BSI}}$ . Ein allgemein gültiger Zahlenwert kann hier nicht angegeben werden, da  $E_{\text{BSI}}$  atom- und ladungszustandsspezifisch ist.

H. Reiss drückt in mehreren, jüngst verfassten Artikeln [26], [27] klare Bedenken darüber aus, dass die fundamentalen Annahmen der bisher veröffentlichten Theorien über Tunnelionisation voraussetzen, dass das externe Feld *longitudinal* ist. Das trifft aber nur in den wenigsten Anwendungsfällen der Modelle zu, da ein Laser-Feld von *transversaler* Natur ist und sich ohne die Notwendigkeit weiterer Quellen im Vakuum unendlich ausbreiten kann. Bei der Betrachtung der Lorentz-invarianten Größe  $\vec{E}^2 - \vec{B}^2$  innerhalb des Gaußschen Einheitensystems wird der Kritikpunkt offensichtlich.

$$\vec{E}^2 - \vec{B}^2 = 0 \quad \text{für ebene Wellen} \quad (3.18)$$

$$\vec{E}^2 - \vec{B}^2 = \vec{E}^2 \quad \text{für quasistat. elektrische Felder} \quad (3.19)$$

Der Unterschied zwischen 3.18 und 3.19 wächst mit dem Quadrat der elektrischen Feldstärke. Reiss führt zwei weitere Parameter zur Eingrenzung der Anwendbarkeit bisheriger Tunnelionisationsmodelle ein. Glücklicherweise scheint die Region der Anwendbarkeit das am häufigsten verwendete Hochleistungs-Lasersystem, den Ti:Sa-Laser (siehe Figur 4 in [27], mit einzuschließen. Mit dem Erreichen immer höherer Laser-Intensitäten  $I \propto \vec{E}^2 > 10^{21} \text{ W/cm}^2$  verlieren das ADK-Modell und andere Tunnelionisationsmodelle, die ebenfalls ein quasistatisches elektrisches Feld voraussetzen jedoch womöglich ihre Anwendbarkeit.

### 3.3.4 Vergleich und maßgebliche Größen für die Implementation

Theorie	$\omega$	Feldstärke $E$	Intensität $I$ [W/cm <sup>2</sup> ] für H-Atom
BSI	$\omega \ll \mathcal{E}_{\text{tab}}$	$E > F_{\text{BSI}} = \frac{\mathcal{E}_{\text{tab}}^2}{4Z}$	$I > 1,37 \cdot 10^{14}$
ADK	$\frac{E}{\sqrt{2\mathcal{E}_{\text{tab}}}} \ll \omega$	$\omega\sqrt{2\mathcal{E}_{\text{tab}}} \ll E \ll F_{\text{BSI}}$	$1,14 \cdot 10^{14} \ll I < 1,37 \cdot 10^{14}$

**Tabelle 3.3:** Übersicht über Gültigkeitsgrenzen der in der Arbeit untersuchten Ionisationsmodelle. In der Spalte der Intensität wurde die Schein-Intensität  $I_{\text{app}} = E_{\text{BSI}}^2$  am Beispiel des Ionisationspotentials des Wasserstoff-Atoms angegeben. Dieser Wert wurde wie in Abschnitt 3.3.3 für das ADK-Modell als Obergrenze der Anwendbarkeit gesetzt. Die Untergrenze wurde aus der Identifikation des Tunnelregimes mithilfe Keldysh-Parameters  $\gamma < 1$  ebenfalls unter der Annahme berechnet, dass es sich um Wasserstoff handelt. Zusätzlich wurde angenommen, dass ein Laser mit einer Wellenlänge von 800 nm verwendet wird.

Tabelle 3.3 zeigt die Grenzen der Anwendbarkeit der beiden Ionisationsmodelle, die im Fokus dieser Arbeit stehen. Die Zahl der maßgeblichen Parameter ist im Vergleich zu Abschnitt 3.2 reduziert. Für die Implementation von Feldionisation in den Particle-in-Cell-Code wird die detaillierte Orbitalstruktur vernachlässigt und Atome werden nur über ihre Kernladungszahl  $Z$ , die tabellierten Ionisationsenergien  $\mathcal{E}_{\text{tab}}$  und ihre Masse identifiziert. Letztere ist für die Verifikation der Ionisationsmodelle ohne Bedeutung. Da das BSI-Modell und das ADK-Modell ein quasistatisches elektrisches Feld voraussetzen, werden alle Mechanismen zur Wellenpropagation in der Simulation ausgeschaltet. Nur der Betrag des elektrischen Feldes  $E$  geht in die Gleichungen zur Berechnung der Ionisationsraten ein.

In der Beschränkung auf diese Parameter können die Eigenschaften der Ionisationsmodelle verifiziert werden, ohne dass eine zusätzliche Teilchen- oder Plasmadynamik die Auswertung erschwert. Im Anschluss an eine Verifikation der Ionisationsmodelle durch Tests, in denen oben aufgeführte Parameter variiert werden, können physikalische Erweiterungen der Ionisations-Implementation vorgenommen werden.

### 3.3.5 Übergang von Ionisationswahrscheinlichkeit zu Ionisationsrate

Im Fall der ADK-Ionisationsrate wurde ein S-Matrix-Ansatz [25] verwendet, um die Übergangsamplitude des anfangs gebundenen Zustands des Elektrons in den Kontinuumszustand zu bestimmen. S-Matrizen entstammen der Streutheorie und führen asymptotische Zustände,

die durch eine gegen unendlich laufende Zeitdauer getrennt sind, ineinander über .

$$S(\vec{p}) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Psi_{\vec{p}} | V_{\text{WW}}(t) | \Psi_0 \rangle dt \quad (3.20)$$

$$dw(\vec{p}) = |S(\vec{p})|^2 d^3p / (2\pi^3) \quad (3.21)$$

Gleichung 3.20 beschreibt den Übergang zwischen einem ungestörten Bindungszustand  $\Psi_0 = \psi_0(\vec{r}) e^{i\epsilon t/\hbar}$  in einen Kontinuumszustand, charakterisiert durch den Photoelektronen-Impuls  $\vec{p}$ . Dieser Kontinuumszustand wird modelliert durch eine *Volkov*-Wellenfunktion. Volkov-Wellenfunktionen sind exakte Lösungen der Schrödingergleichung, die die Bewegung eines freien Elektrons unter Einfluss eines elektromagnetischen Feldes beschreiben. Das Quadrat der Übergangsamplitude  $|S(\vec{p})|^2$  wurde dann mit der Zustandsdichte der finalen Kontinuumszustände multipliziert. Die so erhaltene Glg. 3.21 beschreibt die differentielle Wahrscheinlichkeit, ein Photoelektron innerhalb des Einheitsvolumens  $d^3p$  um den Impuls  $\vec{p}$  im Phasenraum zu finden.

$$\frac{dw}{d\Omega} = \frac{p\omega D^2}{8\pi^3 n^* E} \exp\left(-\frac{2Z^3}{3En^{*3}} - \frac{p_{\perp}^2 Z}{n^* E} - \frac{p_{\parallel}^2 \gamma^3}{3\omega}\right) \quad (3.22)$$

Nach einer Integration über Impuls und Division durch die Zeit erhält man die Winkel- und Energieverteilung der aus dem Atom getunnelten Photoelektronen. Das Resultat für lineare Polarisierung im ADK-Modell hat die Form von Glg. 3.22. Die Impulskomponente  $p_{\parallel}$  ist parallel zur Polarisationsrichtung des Lasers und die Komponente  $p_{\perp}$  ist senkrecht dazu orientiert. Durch weitere Annahmen über die Winkelverteilung in Abhängigkeit von der Polarisierung des E-Felds sowie Kleinwinkelnäherungen, können die absoluten Ionisationsraten hergeleitet werden (Resultat: siehe 3.15).

Aus welchem Grund werden Ionisationsraten und nicht Wahrscheinlichkeiten für die Implementation in Particle-in-Cell-Codes benötigt? Um diese Frage zu beantworten, muss dem Abschnitt 4.1 vorgegriffen werden. Der PIC-Algorithmus ist eine Testteilchenmethode zur Lösung der *kollisionslosen Boltzmann-Gleichung* 4.2, die auch als *Vlasov-Gleichung* bekannt ist.

$$\underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \cdot \vec{\nabla} + \vec{F} \frac{\partial}{\partial \vec{p}}\right)}_{\text{Liouville-Operator}} f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{Stöße}} \quad \text{Boltzmann-Gleichung} \quad (3.23)$$

Die Funktion  $f = f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  in der Boltzmann-Glg. (3.23) ist die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für Teilchen. Die Größe  $m$  ist die Teilchenmasse und  $\vec{F}$  ist eine von außen einwirkende Kraft. Bei Betrachtung eines Plasmas gilt Glg. (3.23) individuell für jede Sorte von Teilchen und Mischterme befinden sich nur im so genannten *Stoßintegral* auf der rechten Seite. Der Differentialoperator, der linksseitig auf die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $f$  wirkt, wird

auch Liouville-Operator genannt und beschreibt die zeitliche Entwicklung des Phasenraumvolumens der Teilchen. Der Ionisationsprozess erhöht die Wahrscheinlichkeitsdichte-Funktion der Elektronen und erhöht somit auch die Gesamtanzahl freier Elektronen.

$$df = \int \frac{df_{\text{Elektronen}}}{dt} dt \quad \text{wird diskretisiert zu} \quad \Delta f = \frac{\Delta f_{\text{Elektronen}}}{\Delta t} \cdot \Delta t \quad (3.24)$$

Da innerhalb der Particle-in-Cell-Simulation die Teilchendynamik durch diskrete Zeitschritte  $\Delta t$  approximiert wird, kann auch die Änderung der Wahrscheinlichkeitsdichte-Funktion  $\Delta f > 0$  nur durch Multiplikation der Änderungsrate mit dem Zeitschritt, gemäß Gleichung 3.24, erfolgen. Das Äquivalent zu  $\Delta f$  in Bezug auf die Ionisation ist die Verteilung der Ionisationswahrscheinlichkeiten  $P$  innerhalb der Simulation.

$$P = \Gamma \cdot \Delta t \quad (3.25)$$

Die Änderungsrate von  $f$  wird mit der Ionisationsrate  $\Gamma$  identifiziert.

### 3.4 Beispiel zur Einordnung von Längen- und Zeitskalen des Ionisationsprozesses

Im Folgenden soll ein kurzes Beispiel gegeben werden, welches die Größenskalen der Ionisation ins Verhältnis zu den Größenskalen der Wechselwirkung eines Hochleistungs-Lasers mit Materie setzt.

Dazu wird ein typischer Betriebsmodus des DRACO-Lasersystems am Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf herangezogen. Der Betrieb dieses Lasersystems findet bei einer Strahlleistung von etwa 100 TW statt. Ein Laserpuls in diesem Modus hat ungefähr die folgenden Eigenschaften

- Pulsdauer  $T_{\text{Puls}} = 30 \text{ fs}$
- Gesamtenergie  $E_{\text{Puls}} = 3 \text{ J}$
- Fokus-Durchmesser  $d_{\text{Fokus}} = 5 \mu\text{m}$
- Wellenlänge  $\lambda = 800 \text{ nm}$

Einige Abschätzungen:

$$\begin{aligned}
 \text{Strahlleistung } P_{\text{Laser}} &= \frac{E_{\text{Puls}}}{T_{\text{Puls}}} = \frac{3 \text{ J}}{3 \cdot 10^{-14} \text{ s}} &= 100 \text{ TW} \\
 \text{Fokusfläche } A_{\text{Fokus}} &= \frac{\pi}{4} d_{\text{Fokus}}^2 &\approx 2 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2 \\
 & &= 2 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2 \\
 \text{Intensität im Fokus } I_{\text{Fokus}} &= \frac{P_{\text{Laser}}}{A_{\text{Fokus}}} &= 5 \cdot 10^{20} \text{ W/cm}^2 \\
 \\
 \text{Pulslänge } L_{\text{Puls}} &= cT_{\text{Puls}} \\
 &\approx 9 \cdot 10^{-6} \text{ m} \\
 &\approx 11 \lambda_{\text{Laser}}
 \end{aligned}$$

Um die Pulsparameter in Relation mit den atomaren Größenskalen des Ionisationsprozesses zu setzen, sind sie nachfolgend in atomaren Einheiten (AU) angegeben:

$$\begin{aligned}
 \lambda_{\text{Laser}} &= 1,5 \cdot 10^4 \text{ Atomradien} \\
 T_{\text{Periode}} &= 1,1 \cdot 10^2 \text{ Orbitalperioden} \\
 I_{\text{Fokus}} &= 1,4 \cdot 10^4 \text{ Schein – Intensitäten} \\
 |\vec{E}|_{\text{max,Fokus}} &= 1,2 \cdot 10^2 \text{ Feldstärke zwischen Kern und } e^-
 \end{aligned}$$

Typische Experimente zur Untersuchung von Feldionisation werden häufig an gasförmigen Targets durchgeführt. Besonders Edelgase wie Argon oder Neon werden dazu verwendet, da diese einatomig vorkommen und reaktionsträge sind. Die nachfolgende Tabelle 3.4 zeigt die Ionisationsenergien  $\mathcal{E}_{\text{tab}}$  sowie die BSI-Feldstärken  $E_{\text{BSI}}$  am Beispiel von Neon.

LZ	0	1+	2+	3+	4+	5+	6+	7+	8+	9+
$\mathcal{E}_{\text{tab}}$	1.6	3.0	4.7	7.1	9.3	11.6	15.2	17.6	87.9	100.2
$E_{\text{BSI}}$	0,063	0,23	0,54	1,3	2,2	3,4	5,8	<u>7,7</u>	190	250

**Tabelle 3.4:** Die obige Tabelle stellt die tabellierten Ionisationspotentiale  $\mathcal{E}_{\text{tab}}$  für die Ladungszustände (LZ) von Neon (siehe [19]) sowie die berechneten BSI-Feldstärken nach Formel 3.6 in atomaren Einheiten (AU) dar.

Die Größenskalen des Ionisationsprozesses bewegen sich unterhalb der Größenordnung einer atomaren Einheit der Zeit, und im Bereich weniger atomarer Einheiten des Orts sowie der Energien und Felder. Anhand der obigen Abschätzung ist erkennbar, dass bei einem Infrarot-Laser wie DRACO, in Wechselwirkung mit Neon mehrfache Ionisation zu erwarten ist. Durch das

BSI-Modell wird eine Beobachtung von Ladungszuständen bis +7 vorausgesagt. Die Laserperiode ist etwa 100-mal länger als die Tunnelzeit, so dass eine DC-Näherung für das ADK-Modell gerechtfertigt ist.

## 3.5 Begriffserklärung: Verifikation und Validierung

Neben der Implementation der Ionisationsmodelle ist das wichtigste Ziel dieser Arbeit diese Modelle auch zu verifizieren und wenn möglich erste Validierungsaussagen treffen zu können. Der Unterschied zwischen den beiden Begriffen wird durch Oreskes [21] detailliert beschrieben und soll hier kurz dargestellt werden.

Der wesentliche zu modellierende *reale Prozess* ist die Tunnelionisation am Atom, wie sie im Abschnitt 3.2.2 beschrieben wurde. Das *konzeptuelle Modell*, welches im Mittelpunkt dieser Arbeit steht, ist das vereinfachte ADK-Modell nach Gleichung (3.15). Als *numerisches Modell* wird die *Implementation* des *konzeptuellen Modells* in einen Particle-in-Cell-Code bezeichnet.

### Verifikation

Die *Verifikation* ist der Prozess der Ermittlung, ob und wie genau das *numerische Modell* das Verhalten und die Lösungen des *konzeptuellen Modells* repräsentiert.

Verifikation geschieht durch die Durchführung von Tests, die so konzipiert sind, dass das Verhalten der Implementation unter Veränderung jeweils nur einzelner Parameter zu untersuchen. Unter Berücksichtigung der Gültigkeit der erhaltenen Daten und mit den Vorhersagen des *konzeptuellen Modells* kann so das *numerische Modell* verifiziert werden.

### Validierung

Als *Validierung* wird der Prozess der Ermittlung, ob und wie genau das *numerische Modell* das Verhalten des *realen Systems* repräsentiert, unter der Annahme, dass die Implementation so verwendet wird, wie es das *konzeptuelle Modell* vorsieht.

Natürlich muss auch das *konzeptuelle Modell* validiert werden. Die Validität dessen soll hier allerdings als gegeben vorausgesetzt werden und findet für gewöhnlich während des Modellierungsprozesses durch Analyse des *realen Systems* statt. Die Validierung der Implementation ist erst nach erfolgreicher Verifikation des *numerischen Modells* möglich, da vorher die Aussagekraft der Lösungen fragwürdig ist. Theoretische Vorhersagen an komplexen Systemen sind oft schwierig, weshalb die Notwendigkeit einer Modellierung überhaupt erst gegeben ist. Somit muss das Verhalten des *numerischen Modells* mit *experimentellen Daten* verglichen werden, um die Validität zu prüfen.



## 4 Implementation

In diesem Kapitel wird detailliert erläutert, wie Feldionisation in PIConGPU implementiert wurde. Des Weiteren wird herausgestellt, was die grundsätzlichen Besonderheiten und Schwierigkeiten für die Implementation auf Architekturen mit hoher Parallelität sind und wie diese überwunden wurden. Mithilfe des vorherigen Kapitels 3 wird motiviert, mit welchem Test-Szenarios die Verifikation des *numerischen* ADK-Modells in Bezug auf die Modellparameter (siehe Abschnitt 3.4) durchgeführt wurde.

### 4.1 Kinetische Plasmasimulationen: der PIC-Algorithmus

In der Plasmaphysik existieren zwei grundlegende Ansätze, um mit computergestützten Methoden kollektive und kinetische Effekte zu untersuchen und im Besonderen nichtlineares Verhalten in Plasmen zu analysieren. Einerseits können Modelle der Magneto-Hydrodynamik (MHD) verwendet werden. Dabei wird die zeitliche Entwicklung von Teilchendichten auf einem Gitter, charakterisiert durch makroskopische Parameter wie Druck und Temperatur beschrieben. Die Magneto-Hydrodynamik vereinigt die Navier-Stokes-Gleichungen der Fluidodynamik mit den Maxwell-Gleichungen zur Beschreibung der Elektrodynamik. Die interessanten Zeitskalen so modellierter Plasmen sind deutlich länger, als die Zeitskalen von Kollisionsprozessen zwischen einzelnen Teilchen. Außerdem sind die untersuchten Längenskalen deutlich größer als die Skintiefe (siehe [18]) des Plasmas und der Larmor-Radius (unter 4.2.1) des Elektrons.

Im Gegensatz zur Magneto-Hydrodynamik stellen kinetische Modelle eine fundamentalere Beschreibung des Plasmas dar. Sie modellieren die zeitliche Entwicklung der Phasenraumdichtefunktion  $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$  der Teilchen. Kinetische Modelle benötigen im Gegensatz zu Fluid-Modellen keine Annahmen über eine Maxwell-Boltzmann-Verteilung der Teilchengeschwindigkeiten im Plasma. Stattdessen ergibt sich die Verteilung selbstkonsistent, da die Trajektorien großer Anzahlen von Teilchen individuell im Simulationsgebiet simuliert werden. Diese Methoden sind daher von deutlich höherem numerischen Aufwand als Fluid-Methoden. Die Wechselwirkung hochintensiver Laserpulse mit Materie wird meist mithilfe kinetischer Modelle simuliert. Die Längenskalen, die hierbei von Interesse sind, setzen eine räumliche Auflösung elektromagnetischer Wellen voraus, da die Feldgleichungen lokal gelöst werden. Zeitlich muss die inverse Elektronen-Plasmafrequenz  $2\pi/\omega_{pe}$  aufgelöst werden.

Kinetische Modelle sind anwendbar für kollisionslose Plasmen, das heißt, dass die Phasenraum-dichte  $f$  der Teilchen zeitlich konstant bleibt.

$$\frac{df}{dt} = 0 \quad (4.1)$$

Kollisionslose Plasmen werden durch die *Vlasov-Maxwell*-Gleichungen, einem Spezialfall der Boltzmann-Gleichung, beschrieben.

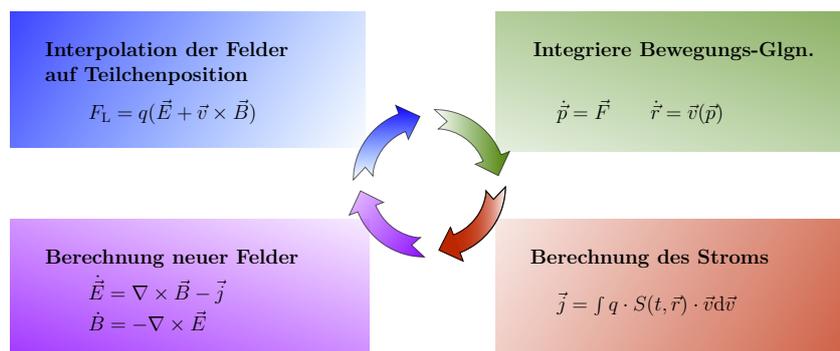
$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{Stöße}} = 0 = \left( \frac{\partial}{\partial t} + \underbrace{\vec{v} \cdot \vec{\nabla}}_{\text{Transportterm}} + \underbrace{\frac{\vec{F}}{m} \frac{\partial}{\partial \vec{v}}}_{\text{Kraftterm}} \right) f(\vec{r}, \vec{p}, t) \quad (4.2)$$

Die Lösungen dieser Gleichungen sind jedoch 6-dimensional. Um sie an jeder Stelle in Raum und Zeit zu lösen, wäre ein gewaltiger rechentechnischer Aufwand nötig. Stattdessen befinden sich die Teilchen in einem Gitter und alle elektromagnetischen Felder werden von den Eckpunkten bzw. Kanten des Gitters auf die Position der Teilchen interpoliert. Die Bewegung der Teilchen durch Einwirkung der Felder erzeugt wiederum Ströme. Diese Ströme erzeugen ihrerseits zeitveränderliche Magnetfelder, und letztere verursachen elektrische Felder. Diese Felder werden zurück auf das Gitter extrapoliert. Somit gelangt man zum *Particle-In-Cell*-Mechanismus [11].

Es ist allerdings ungünstig, einzelne *reale Teilchen* zu simulieren, da innerhalb der Zellen im PIC-Algorithmus das Gauß-Gesetz

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho \quad (4.3)$$

nicht explizit beachtet wird und damit keine Nahfeld-Wechselwirkung zwischen geladenen Teilchen stattfindet. Es wird ausgenutzt, dass die Nahfelder von Teilchen im Plasma durch andere Teilchen dynamisch abgeschirmt werden ([18]). Die maßgebliche Längenskala für den Abschirmeffekt wird durch die Debye-Länge  $\lambda_D$  beschrieben. Bei der Modellierung der Phasenraum-dichte-Funktion  $f(\vec{r}, \vec{v}, t)$  wird im PIC-Schema ein Kompromiss zwischen Abtastgenauigkeit und Rechenaufwand getroffen, der die Größe des Elements  $\Delta f$  bestimmt. Dieses wird *Makroteilchen* genannt und repräsentiert eine Anzahl realer Teilchen durch die *Gewichtungsfunktion*  $w$ . Damit müssen nur noch die 3-dimensionalen Bewegungsgleichungen für  $N_T$  Makroteilchen gelöst werden.



**Abbildung 4.1:** Elektromagnetischer PIC-Algorithmus. Ein PIC-Schritt innerhalb der Simulation entspricht einem Umlauf des obigen Schemas.

Der PIC-Algorithmus läuft in einzelnen Zeitschritten endlicher Länge ab, während derer stets die gleiche Abfolge an Prozessen abgearbeitet wird.

- 1.) Alle elektrischen und magnetischen Felder werden vom Rand der Zellen aus auf die relative Position des Teilchens in der Zelle interpoliert. Dabei sind der Überlapp der Ausdehnung des Makroteilchens mit der Zelle sowie die Gewichtungsfunktion ausschlaggebend für die zugeordnete Ladung.
- 2.) Es werden die Bewegungsgleichungen für jedes Teilchen gelöst.
- 3.) Die durch die Teilchenbewegung verursachten Ströme werden berechnet.
- 4.) Zuletzt werden mithilfe der Maxwell-Gleichungen die durch Ströme erzeugten, zeitveränderlichen magnetischen Felder berechnet. Diese erzeugen wiederum elektrische Felder.

#### 4.1.1 Einschränkungen an Simulationsgrößen durch den PIC-Algorithmus

Der PIC-Algorithmus stellt einige Anforderungen (siehe [11]) an die Simulationsgrößen, was besonders durch die Integration der Bewegungsgleichungen sowie die Interpolation der Felder auf die Teilchen bedingt ist. Die hauptsächlichen Kriterien sind:

- *Konvergenz* der numerischen Lösung der Differentialgleichungen gegen die exakte Lösung
- numerische *Stabilität*, also Konstanz der Abschneide- und Rundungsfehler über die Zeit
- *Effizienz* der Lösungsmethode, da sie für jedes Teilchen in jedem Zeitschritt angewendet werden muss
- Erfüllung der *Erhaltungsgleichungen*, also Ladungs-, Impuls- und Energieerhalt

- ausreichende räumliche und zeitliche *Abtastung*, um den Betrag der Fehler durch numerisches Rauschen klein zu halten sowie alle Effekte in der zeitlichen Entwicklung zu berücksichtigen

Verschiedene Studien (u.a. [4]) haben gezeigt, dass es ein Set von Richtlinien gibt, die bei der Wahl des Zeitschritts  $\Delta t_{\text{PIC}}$  und der Zellgröße  $\Delta x_{\text{PIC}}^i$  zu beachten sind, um oben genannte Kriterien zu erfüllen.

- *Courant-Friedrichs-Lewy-Kriterium*:  $\Delta t_{\text{PIC}} < \frac{1}{c \sqrt{\sum_i \frac{1}{\Delta x_{\text{PIC}}^i{}^2}}}$

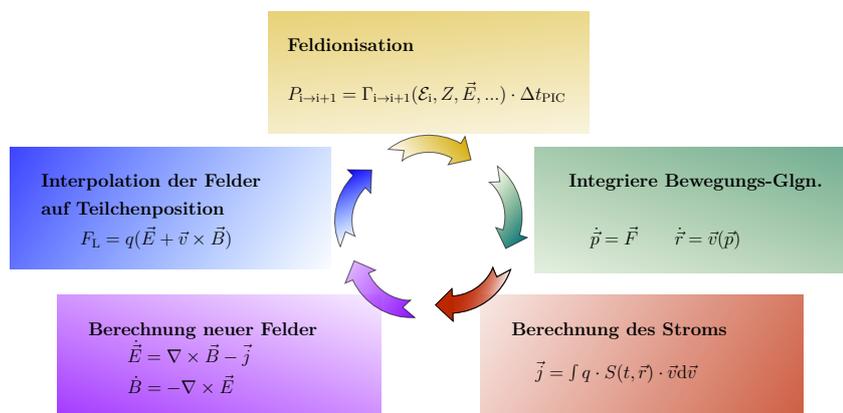
Das CFL-Kriterium verbindet die örtlichen und zeitlichen Domänen miteinander. Es folgt aus der Tatsache, dass die Lösungen der Feldgleichungen im PIC-Schema *lokal* sind. Das CFL-Kriterium stellt sicher, dass die Informationen aus diesen Lösungen (bspw. eine Ladungsstromdichte) sich nur mit endlicher Geschwindigkeit und um nicht weiter als eine Zelle pro Zeitschritt ausbreiten kann.

- $\omega_{\text{max}} dt < 0,25$

Diese Bedingung ist die untere Auflösungsgrenze für die maximal im Code abzutastende Frequenz.

- Jede auftretende Wellenlänge sollte mindestens mit  $dx < \frac{\lambda}{m}$ ,  $m \approx 6 - 12$  aufgelöst werden
- Anzahl Makroteilchen pro Spezies und Zelle: 4-9

## 4.2 Einbindung von Ionisation in das PIC-Schema



**Abbildung 4.2:** Elektromagnetischer PIC-Algorithmus erweitert um die Routine zur Feldionisation.

In der Abbildung 4.2 ist zu sehen, dass der PIC-Schritt um eine Ionisationsroutine erweitert wurde. Diese wurde zwischen der Interpolation der Felder auf die Teilchenpositionen und

der Integration der Bewegungsgleichungen, dem *Push*, eingefügt, da die Zeitdauer für eine Ionisation ( $< 1$  AU) (siehe Abschätzung in 3.3.3) deutlich kürzer ist, als die Zeitdauer für die Ausführung der Bewegung durch das Feld ( $> 1$  AU), sofern die Änderung des Feldes in dieser Zeit gegenüber der maximalen erwarteten Amplitude vernachlässigbar ist. Diese Annahme gilt somit nicht für Laser, deren Wellenlänge kleiner als 10 nm liegt, da sich die Laserperiode dann im Bereich von 1 AU der Zeit befindet.

Die neu erzeugten Elektronen werden an der Position des Mutter-Ions initialisiert, um zu verhindern, dass die Kontinuitätsgleichung durch künstliche Verschiebungsströme verletzt wird. Während der Arbeit wurde noch nicht der Energieverlust des elektromagnetischen Feldes durch den Ionisationsprozess implementiert. Allerdings wurde bewusst diese Stelle im PIC-Algorithmus ausgewählt, damit die erzeugten Elektronen anschließend im gleichen Zeitschritt aufgrund der um  $\mathcal{E}_{\text{Ionisation}}$  reduzierten Feldenergie  $\mathcal{E}_{\text{Feld}}$  bewegt werden.

$$\mathcal{E}_{\text{kin}} = \mathcal{E}_{\text{Feld}} - \mathcal{E}_{\text{Ionisation}} \quad (4.4)$$

### 4.2.1 Vorgaben an die Auflösung bedingt durch Plasmaparameter

Um mit den PIC-Algorithmus tatsächlich kollisionslose Plasmen zu beschreiben, müssen wiederum Einschränkungen an die Simulationsgrößen beachtet werden. Plasmen bestehen aus geladenen und ungeladenen Teilchen und sind dadurch gekennzeichnet, dass die Dynamik nicht durch Kollisionen, sondern durch kollektive Effekte, also den langreichweitigen Teil des relativistischen Wechselwirkungspotentials, dominiert werden. Das folgt aus einer weiteren Eigenschaft von Plasmen, der *Quasineutralität*. Ein Plasma erscheint auf Längenskalen mehrerer Debye-Längen  $\lambda_D$  neutral, da elektrische Ladungen einander gegenseitig abschirmen. Dieser Prozess wird als *Debye-Abschirmung* bezeichnet.

Da der PIC-Algorithmus, wie zuvor festgestellt, die kurzreichweitigen Wechselwirkungen zwischen Teilchen nicht explizit berechnet, müssen die Simulationsparameter so gewählt werden, dass die Debye-Länge

$$\lambda_{\text{Debye}} = \frac{v_{\text{thermisch}}}{\omega_{\text{pe}}} \propto \left( \frac{T}{n_e} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.5)$$

$$= \sqrt{\frac{\epsilon_0 k T_e}{n_e e^2}} \quad (4.6)$$

eine untere Auflösungsgrenze darstellt.

Gleichung 4.6 beschreibt die Debye-Länge im Plasma. Dabei bezeichnen  $\epsilon_0$  die Permittivität des Vakuums,  $k$  die Boltzmann-Konstante,  $T_e$  die Elektronentemperatur,  $n_e$  die Elektronendichte und  $e$  die Elektronenladung. Durch die Debye-Länge ist gleichzeitig die *Debye-Kugel* definiert, da die Abschirmung des Potentials  $\Phi$  einer Ladung im Plasma mit  $\Phi = \Phi_0 \exp(-r/\lambda_{\text{Debye}})$

exponentiell zunimmt.

$$N_p = n_e \frac{3}{4} \pi \lambda_{\text{Debye}}^3 \quad (4.7)$$

Gleichung 4.7 beschreibt die Berechnung des *Plasma-Parameters*, welcher Zahl der Teilchen in der Debye-Kugel beschreibt. Prozesse der Plasmadynamik sind auf folgenden Größenskalen beobachtbar:

- $L \gg \lambda_{\text{Debye}}$   
*Die interessanten Längenskalen sind zumeist größer als die Debye-Länge. Damit das Konzept der Makroteilchen gerechtfertigt ist, muss  $N_p \gg 1$  gegeben sein.*
- $t \gg 2\pi/\omega_{pe}$  mit  $\omega_{pe} = \sqrt{4\pi n_e}$  Plasmen zeichnen sich durch kollektive Effekte aus. Da die Atomrümpfe aufgrund ihrer hohen Masse träge sind, ist die maßgebliche Zeitskala durch die kollektive Elektronendynamik gegeben. Die Plasmafrequenz ist hauptsächlich abhängig von der Elektronendichte.
- $t > 2\pi/\omega_{\text{Larmor}}$ ,  $\omega_{\text{Larmor}} = \frac{eB}{c}$  (in AU)  
*Weiterhin führen die Elektronen im Plasma Oszillationsbewegungen aus, die mit der Stärke des magnetischen Feldes skaliert.*

Um die Dynamik auf den interessanten Skalen beobachten zu können, sollte die Plasmafrequenz durch den Zeitschritt  $\Delta t_{\text{PIC}}$  aufgelöst werden. Die Debye-Länge kann als untere Auflösungsgrenze an die Zellgröße  $\Delta x_{\text{PIC}}^i$  verstanden werden. Die Ausdehnung eines Makroteilchens sowie die Anzahl der Elektronen, die es im PIC-Algorithmus repräsentiert, wird durch  $\Delta x_{\text{PIC}}$ ,  $\Delta t_{\text{PIC}}$  und die Elektronendichte  $n_e$  bestimmt. Die Einschränkungen, die der PIC-Algorithmus an die Modellierung des Plasmas setzt, werden im nächsten Abschnitt mit den typischen Größenskalen des Ionisationsprozesses verglichen.

### 4.2.2 Skalenvergleich PIC-Schema und Ionisationsprozess

Um nun einen Skalenvergleich durchzuführen, wird das Beispiel aus Abschnitt 3.4 mit einem typischen Hochleistungspuls der 100 TW-Stufe des DRACO-Lasers betrachtet. Dabei werden die Auflösungsanforderungen an die Simulationsparameter durch sowohl Plasma als auch das PIC-Schema verwendet und die Ergebnisse in atomaren Einheiten angegeben, um den Bezug zum Ionisationsprozess intuitiv zu verdeutlichen.

Parameter		in AU
$n_e$	$1 \cdot 10^{26} \text{ m}^{-3}$	$1,5 \cdot 10^{-5} \text{ AU}^{-3}$
$T_e$	$1 \cdot 10^2 \text{ eV}$	3,7 AU
$\omega_{pe}$	$6 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$	$1,4 \cdot 10^{-2} \text{ AU}^{-1}$
$\lambda_{\text{Debye}}$	$7 \cdot 10^{-9} \text{ m}$	$1,3 \cdot 10^2 \text{ AU}$
$\nu_{ei}$	$2 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$	$4,8 \cdot 10^{-5} \text{ AU}^{-1}$

**Tabelle 4.1:** Übersicht der Größenordnungen von Plasma-Parametern in vom DRACO-Lasersystem erzeugten Plasmen.

Ein Plasma wird als *überdicht* bezeichnet, wenn die Elektronendichte im Plasma so hoch ist, dass eine eingestrahlte elektromagnetische Welle der Frequenz  $\omega_{\text{Laser}}$  an der Oberfläche des Plasmas reflektiert wird und nur mit exponentieller Abschwächung eindringt. Ausschlaggebend dafür ist, dass die Elektronen in kollektiver Dynamik der Laserwelle bis zu einer Grenzfrequenz  $\omega_{pe}$  folgen können. Überschreitet die eingestrahlte Frequenz  $\omega_{\text{Laser}}$  die Plasmafrequenz, so wird das Plasma für die Welle transparent und man bezeichnet es als *unterdicht*. Der Puls des DRACO-Lasers hat eine Frequenz von  $\omega_{\text{Laser}} = 2,4 \cdot 10^{-1} \text{ AU}$ . Diese Frequenz ist größer als die Plasmafrequenz aus Tabelle 4.1. Damit ist das erzeugte Plasma unterdicht und der Laser wird transmittiert.

Unter der Annahme, dass die typischen Größenskalen für den Ionisationsprozess alle von der Ordnung  $\lesssim \mathcal{O}(1) \text{ AU}$  sind, wird in Tabelle 4.1 ersichtlich, dass die charakteristischen Größenskalen im Plasma um 1-2 Größenordnungen darüber liegen. Somit sind die Variationen einzelner Größen auf Skalen des Ionisationsprozesses annähernd vernachlässigbar. Diese Aussage ist jedoch nur zunächst gültig für unterdichte Plasmen und Laserpulse, deren Wellenlängen nicht viel kleiner sind, als die im Beispiel verwendeten  $\lambda = 1500 \text{ AU}$ . Für Pulse kleinerer Wellenlängen bei ähnlicher Intensität nähern sich die PIC-Auflösungsgrenzen den Größenordnungen der quantenmechanischen Prozesse im Atom an. Gleiches ist gegeben, wenn die Interaktion eines sehr intensiven Laserpulses mit einem *überdichten* Material simuliert wird. Der Laser wird dabei an der Oberfläche reflektiert und dringt nur noch einige 10. 100 nm weit ein. Die Länge, auf der die Laser-Intensität um  $1/e$  abfällt, wird als *Skin-Tiefe* bezeichnet. Auf diesen Größenskalen fällt die Intensität exponentiell ab und überschreitet durchaus mehrere Größenordnungen auf der Länge weniger Atomradien. Beide Fälle bedeuten, dass die Annahmen der meisten Tunnelionisationsmodelle verletzt werden, da das elektrische Feld auf atomaren Größenskalen nicht mehr als *quasistatisch* angesehen werden kann.

	PIC-Schema	Plasma
$\Delta t_{\text{PIC}}$	11 AU	$\tau_{\text{pe}} = 430 \text{ AU}$
$\Delta x_{\text{PIC}}$	1500 AU	$\lambda_{\text{Debye}} = 130 \text{ AU}$

**Tabelle 4.2:** Einschränkungen an die Simulationsgrößen: PIC-Zeitschritt  $\Delta t_{\text{PIC}}$  und Zellgröße  $\Delta x_{\text{PIC}}$  unter der Voraussetzung, dass ein Laser der Wellenlänge  $\lambda = 1,5 \cdot 10^4 \text{ AU}$  verwendet wird, der im Plasma eine Elektronendichte von  $10^{26} \text{ m}^{-3}$  erzeugt.

Bei dem Beispiel des DRACO-Pulses ist an Tabelle 4.2 zu sehen, dass die obere Grenze des durch das PIC-Schema vorgegebenen Zeitschrittes  $\Delta t_{\text{PIC}}$  mit 11 AU die inverse Plasmafrequenz gut auflöst. Dagegen ist die Debye-Länge mit 130 AU deutlich kleiner als die Zelldimension  $\Delta x_{\text{PIC}}$ . Sie gibt die untere Grenze für ein zulässiges  $\Delta x_{\text{PIC}}$  an. Dazu soll vorher eine Abschätzung über die vorher zu erwartende Teilchenanzahl gemacht werden. Angenommen die Dichte des zuvor neutralen Neon-Gases in der Simulation beträgt  $n_0 = 1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , dann wäre die klassische Erwartung durch das BSI-Modell, dass durch den Laser mindestens 7-fach ionisiert wird (siehe Tab. 3.4. Durch weitere Tunnelionisation sollte sich die finale Elektronendichte bei etwa  $n_e = 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  befinden.

$$\begin{aligned} \text{Simulationsgebiet : } \quad V &= 50 \mu\text{m} \cdot 50 \mu\text{m} \cdot 100 \mu\text{m} \\ &= 2,5 \cdot 10^{-13} \text{ m}^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} L_x, L_y &\approx 1 \cdot 10^5 \text{ AU} \\ L_z &\approx 2 \cdot 10^5 \text{ AU} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Anzahl realer Teilchen: } N_{\text{T}} = V n_0 &= 1 \cdot 10^{12} \quad \text{Ionen} \quad \dots \quad 1 \cdot 10^{13} \quad \text{Elektronen} \\ \text{Elektronen in der Debye-Kugel: } N_{\text{P}} = V_{\text{Debye}} \cdot n_e &\approx \underline{144} \gg 1 \quad \text{wenn ionisiert} \end{aligned}$$

Die obenstehende Abschätzung zeigt, dass im Durchschnitt 144 Elektronen innerhalb der Debye-Kugel zu erwarten sind. Damit wird die Bedingung erfüllt, dass  $N_{\text{P}} \gg 1$  und somit ist es zulässig, dass die Phasendraumdichtefunktion  $f$  des Plasmas durch Makroteilchen approximiert wird. Im Folgenden sei die  $z$ -Dimension die Propagationsrichtung des Laser-Pulses. Zur Modellierung von Elektronenbeschleunigung durch den DRACO-Laser muss die Laserwellenlänge in longitudinaler Richtung gut aufgelöst werden und wird deswegen mit 10 Stützstellen abgetastet. In transversaler Richtung sind die Anforderungen nicht so strikt und daher werden nur 5 Stützstellen verwendet. So kann Rechenaufwand während der Simulation eingespart

werden.

$$\begin{aligned}\Delta x, \Delta y &= 3 \cdot 10^3 \text{ AU} && \rightarrow 333 \text{ Zellen} \\ \Delta z &= 1,5 \cdot 10^3 \text{ AU} && \rightarrow 1333 \text{ Zellen}\end{aligned}$$

$$N_{\text{Zellen}} = 333^2 \cdot 1333 \approx 1,5 \cdot 10^8$$

$$\frac{N_{\text{T}}}{N_{\text{Zellen}}} = 6,7 \cdot 10^3 \rightarrow \text{wähle 7 Makroteilchen pro Zelle}$$

$$N_{\text{MT}} = 1 \cdot 10^9 \text{ unionisiert .. } 1 \cdot 10^{10} \text{ ionisiert}$$

$$\Rightarrow \text{Weighting : } w \approx 952$$

Diese ersten Abschätzungen sollten vor jeder Simulation durchgeführt werden, um zu vermeiden, dass Code-Instabilitäten zur Beobachtung unphysikalischer Resultate führen.

Die Test-Szenarien in dieser Arbeit erfordern genauere Vorhersagen der Ladungszustandsentwicklung, als es mit dem oben verwendeten BSI-Modell möglich ist. Wie diese erhalten wurden beschreibt der nächste Unterabschnitt.

### 4.2.3 Vorhersage der Ladungszustandsverteilung durch Markov-Ketten

Die Vorhersage der Ladungszustandsverteilung in einer vollständigen Plasmasimulation kann immer nur unter Vereinfachungen geschehen, da sowohl Plasmadynamik als auch Atomphysik zufällig ablaufen und die Verbindung beider gerade die Simulation erfordern. Es ist möglich für ein einzelnes Atom unter Kenntnis der externen Felder eine genauere Erwartung an die auftretenden Ladungszustände zu geben. Allerdings erfordert auch das umfassende Rechnungen, die oft nur durch numerische Methoden bei der Lösung der zeitabhängigen Schrödinger- bzw. Dirac-Gleichung mit einem HPC-System zu bewältigen sind ([32]).

**Markov-Prozess** In dieser Arbeit soll die Implementation eines *konzeptuellen* Ionisationsmodells verifiziert werden. Das Modell vereinfacht bereits die zugrunde liegende Physik und die Testszenarios vernachlässigen die Plasmadynamik. Damit kann jeder einzelne Ionisationsprozess als *statistisch unabhängig* von allen anderen angesehen werden. Die einzelnen Makroteilchen in der Simulation können stets nur *einen Ladungszustand* annehmen und durch das konzeptuelle Modell ist der Übergang in den nächsten Zustand durch eine *Rate* für den aktuellen Zeitschritt bestimmt. Diese Rate hängt ausschließlich vom *aktuellen Zustand* des Systems ab, also von elektrischer Feldstärke, Kernladungszahl und Ladungszustand. Damit sind die Bedingungen für den *Markov-Prozess* erfüllt [20].

**Markov-Kette** Eine Markov-Kette ist eine Kombination von Wahrscheinlichkeiten und Matrixoperationen und beschreibt einen Prozess, der in diskreten Schritten abläuft. Das System, welches dem Markov-Prozess unterliegt, kann sich immer nur in *einem* Zustand befinden und im nächsten Schritt kann es im gleichen Zustand bleiben oder in einen anderen wechseln. Übergänge zwischen Zuständen sind durch *Übergangswahrscheinlichkeiten* definiert. Ein großer Nutzen der Markov-Kette ist, dass für alle zukünftigen Zeiten die Wahrscheinlichkeiten das System in einem bestimmten Zustand zu finden, berechnet werden können, sofern der Eingangszustand und die Übergangswahrscheinlichkeiten bekannt sind.

**Vorhersage von Ladungszuständen** Die Idee ist, dass, bei ausreichend feiner Auflösung der Zeit, die Ionisationsrate für jeden Ladungszustand als konstant angesehen werden kann. Dabei wird so fein aufgelöst, dass die Zeit im Vergleich zur Simulation quasi-kontinuierlich erscheint. Die Anzahl der Markov-Schritte pro PIC-Zeitschritt sollte mindestens so groß sein wie die Anzahl an Außenelektronen des zu modellierenden Atoms, da es möglich wäre, dass ein Atom in einem Schritt vollständig ionisiert wird. Da in einem Schritt der Markov-Kette nur eine Ionisation vollzogen werden kann, werden aber mindestens  $Z \cdot 10$  Markov-Schritte pro PIC-Schritt angesetzt. Für das Element Neon ist die Kernladungszahl  $Z = 10$  und daraus ergeben sich die 100 Markov-Schritte pro PIC-Schritt. Grundsätzlich läuft die Voraussage einer Wahrscheinlichkeitsverteilung des Endzustands des Systems für eine kontinuierliche Rate wie folgt ab:

$$x_{\text{Ende}} = x_{\text{Anfang}} \cdot \underbrace{T^{N_{\text{Schritte}}}}_{\text{Übergangsmatrix}} \quad (4.8)$$

Ein Schritt des Markov-Prozesses ist unabhängig von der bisherigen Historie des Systems und die Übergangswahrscheinlichkeiten in andere Zustände hängen allein vom aktuellen Zustand des Systems ab. Für die klassische Markov-Kette ist die Übergangsmatrix fest und in jedem Schritt des Prozesses gleich. Für die Anwendung auf Ionisation kann sich die Übergangsmatrix jedoch in jedem Schritt ändern, da sich die Übergangsraten aus dem zeitabhängigen elektrischen Feld berechnen. Aus diesem Grund wird die Berechnung des jeweiligen Endzustands *numerisch* für alle Schritte  $t_n$  des Prozesses ausgeführt.

Ein Zustand  $x|_{t_n} = x_n$  ist ein Vektor mit  $(Z + 1)$  Einträgen, deren Summe 1 ergibt. Die  $i$ -te Komponente beschreibt die Wahrscheinlichkeit das Atom im  $i$ -ten Ladungszustand vorzufinden. Es wurde eine Schleife über alle  $n \leq N_{\text{Schritte}}$  implementiert, wobei in jedem Schritt folgende Anweisungen abgearbeitet wurden:

- I Berechne  $T|_{t_n}$ , die Übergangsmatrix zum Zeitpunkt  $t_n$  aus der lokalen Feldstärke mit der ADK-Ionisationsrate für jeden Ladungszustand.

II Errechne den neuen Zustand des Systems mittels

$$x_n = x_{n-1}^T \cdot T|_{t_n} \quad (4.9)$$

III Speichere Ladungszustandsverteilung in einem Array ab

. Die Übergangsmatrix in jedem Schritt hat die folgende Form:

von \ nach	0	1	2	...	Z+
0	$e^{-\Gamma_{0 \rightarrow 1} \Delta t_n}$	$1 - e^{-\Gamma_{0 \rightarrow 1} \Delta t_n}$	0	...	0
1	0	$e^{-\Gamma_{1 \rightarrow 2} \Delta t_n}$	$1 - e^{-\Gamma_{1 \rightarrow 2} \Delta t_n}$	...	0
2	0	0	$e^{-\Gamma_{2 \rightarrow 3} \Delta t_n}$	...	0
...	...	...	...	...	...
Z+	0	0	0	...	1

**Tabelle 4.3:** Übergangsmatrix für Ionisation in einem Schritt  $t_n$  der Markov-Kette. Die Summe der Einträge in jeder Zeile ergibt 1, da die Summe aller Wahrscheinlichkeiten aus einem Ladungszustand  $i$  in einen Ladungszustand  $j$  überzugehen 100% beträgt und die Gesamtwahrscheinlichkeit über die Markov-Kette erhalten bleiben muss.

Die Elemente in der Hauptdiagonale beschreiben jeweils die Wahrscheinlichkeit dafür, dass das Elektron gebunden und damit das Atom im jeweiligen Ladungszustand verbleibt. Da die Ionisationsmodelle jeweils nur die Ionisation des äußersten Elektrons beschreiben, sind alle Elemente oberhalb der ersten oberen Nebendiagonale gleich Null. Zudem wird *Rekombination* nicht betrachtet und daher sind alle Elemente unterhalb der Hauptdiagonale auch Null. Damit kann man die Markov-Kette durch

$$x_t = x_0 \cdot \prod_{t_0}^t T(E(t'))|_{t'} \quad (4.10)$$

beschreiben.

**Subsampling:** Mit dieser Methode wäre es prinzipiell auch möglich, innerhalb eines Zeitschritts in der PIC-Simulation eine Übergangsmatrix zu berechnen, die Mehrfachionisation beschreibt. Dazu wären mindestens  $Z$  Matrixmultiplikationen nötig, um auch in jedem Zeitschritt vollständige Ionisation des Atoms nicht auszuschließen. Der Eingangszustand des Makroteilchens  $x_0$  ist ein  $(Z+1)$ -dimensionaler Vektor, der bis auf eine 1 an der Stelle des aktuellen Ladungszustands nur Nullen enthält. Man könnte mittels eines Prediktor-Korrektor-Verfahrens den Verlauf des E-Felds im Zeitschritt approximieren und dann  $Z - C$  Übergangsmatrizen berechnen und multiplizieren. Sobald Rekombinationsprozesse möglich wären, müsste die Anzahl von Subsampling-Schritten auf andere Weise abgeschätzt werden.

## 4.3 PIC-Simulationen auf parallelen Vielkern-Architekturen

Die Grenzen der PIC-Simulation sind bestimmt durch einerseits die *Zeit*, die der Anwender bereit ist, auf Resultate zu warten und andererseits den Speicher der verwendeten Maschine, der die mögliche Anzahl simulierbarer Teilchen beschränkt. Es existieren bereits mehrere Code-Projekte (bspw. [31]), die den PIC-Algorithmus auf Rechenclustern mit Tausenden von CPUs ausführen können. Bei steigender Zahl von Rechenkernen wird die Zeit, um ein Problem fester Größe zu lösen, deutlich verringert. Andererseits kann die Problemgröße bei fester Lösungszeit mit steigender Anzahl an CPU-Kernen entsprechend proportional vergrößert werden. Derartige Hochleistungsrechner sind jedoch teuer und nehmen beträchtlichen Raum ein. Weniger verbreitet ist die Implementation des PIC-Algorithmus auf GPGPUs, *general purpose graphics processing units*. GPUs werden gewöhnlich zur Berechnung und Darstellung grafischer Effekte und Anwendungen besonders in der Computerspiele-Industrie verwendet. In den letzten Jahren werden allerdings vermehrt auch GPUs bei der numerischen Lösung wissenschaftlicher Probleme eingesetzt. Sie führen eine zusätzliche Stufe der Parallelität ein, da beim Betrieb einer Grafikkarte mehrere Blöcke (*Thread Blocks*) von Prozessen, genannt *Threads*, parallel gestartet werden. Die Anzahl der gleichzeitig gestarteten *Threads* entspricht maximal der Anzahl von Prozessoreinheiten eines *symmetrischen Multiprozessors* unter Berücksichtigung des zur Verfügung stehenden Speichers. Mehrere symmetrische Multiprozessoren befinden sich auf einer GPU.

CPUs sind im Vergleich mit einer einzelnen Mikro-Prozessor-Einheit der GPU von höherer Komplexität und Rechenleistung. Die schiere Anzahl der Mikroprozessoren der GPU ermöglichen jedoch bei Parallelisierung des Problems einen beträchtlichen Geschwindigkeitsvorteil gegenüber der CPU. Um das volle Potential der GPGPU-Architektur ausnutzen zu können, muss das jeweilige Problem auf die Hardware optimiert werden. Dazu existieren auf der GPU verschiedene Speicherstrukturen unterschiedlicher Geschwindigkeit.

### 4.3.1 Herausforderungen an die Implementation von Ionisation auf GPU

Die Makroteilchen innerhalb der PIC-Simulation in *PIConGPU* sind in Listen von so genannten *Frames* angeordnet. Das Simulationsgebiet ist in Superzellen unterteilt, um die Daten der elektromagnetischen Felder gruppieren zu können. Frames sind virtuelle Strukturen, die die Vektoren der Teilchenattribute zusammenfassen. Diese Vektoren besitzen so viele Einträge, wie die Anzahl der Zellen in der Superzelle. Diese Datenstruktur ist notwendig, um das gleichzeitige Arbeiten aller Threads *Cache*-optimiert auf den Attributen der Teilchen in einer Superzelle zu ermöglichen. Um Abfragen auf den Füllstand der Frames zu sparen und so effektiver zu arbeiten, sind alle Frames in einer Superzelle bis auf den letzten in der Liste vollständig gefüllt. Die Teilchen sind jedoch *unsortiert* und der Index des Teilchens im Frame erlaubt keinen

Rückschluss auf die Position der Zelle in der Superzelle. Der Ionisationsalgorithmus muss also so geschrieben sein, dass er *allgemeingültig* für variable Orte und Zeiten und bei gleichzeitiger Ausführung durch mehrere *Threads* die richtige Anzahl an Teilchen erzeugt werden.

### Teilchenerzeugung während der Laufzeit

Mit der Einführung von Ionisation in *PIConGPU* musste ermöglicht werden, dass Teilchen während der Laufzeit der Simulation erzeugt werden können. Zuvor war die Anzahl der Teilchen konstant und bereits vor der Simulation bekannt. Wie oben beschrieben, ist es aber von äußerster Wichtigkeit, dass der Speicher und die Prozessoreinheiten der GPU optimal ausgenutzt werden, um die maximale Rechen-Beschleunigung zu erhalten. Zur Erzeugung von Teilchen während der Laufzeit muss Speicher *dynamisch allokiert* werden ([7]).

In *PIConGPU* ist es derzeit möglich, etwa 50 Millionen Makroteilchen pro GPU (NVidia Tesla K20x) zu simulieren, was mehreren Millionen Teilchen pro Gigabyte Grafikspeicher entspricht. Mit dem obigen Beispiel aus Unterabschnitt 4.2.2 bräuchte man also 20 - 200 GPUs (je nach Ionisationsgrad). Um dieses Problem zu umgehen, könnte ein Algorithmus für so genanntes *Particle-Merging* implementiert werden. Dieser Algorithmus muss allerdings noch entwickelt und implementiert werden. Diese Aufgabe würde über den Rahmen dieser Arbeit hinausgehen. Problematisch dabei ist die korrekte Definition von Kriterien, die zur Verschmelzung von Teilchen führen sollen, was Gegenstand aktueller Forschung ist. Erste Ideen und deren Umsetzung wurden kürzlich veröffentlicht von M. Vranić [33].

### Monte-Carlo-Prozesse und Seeding

Ein weiteres Problem, dass die Implementation von Ionisation auf GPUs mit sich bringt, ist die Erzeugung von Zufallszahlen. Abgesehen vom BSI-Modell, dessen instantane Ionisation unphysikalisch ist, sind Ionisationsmodelle meist Ratenmodelle. In Abhängigkeit vom Zeitschritt  $\Delta t_{\text{PIC}}$  ergibt sich eine Ionisationswahrscheinlichkeit. Das erfordert die Durchführung von Monte-Carlo-Prozessen auf der Grafikkarte. Um die Geschwindigkeit der GPU nicht einzuschränken und dennoch statistische Unabhängigkeit gewährleisten zu können, ist es nötig, dass eine ungeheure Anzahl von Zufallszahlen in sehr kurzer Zeit erzeugt wird.

Orientiert am Beispiel aus Unterabschnitt 4.2.2 würde man bis zu  $1 \cdot 10^9$  Zufallszahlen pro Zeitschritt benötigen. Die Berechnung eines PIC-Zeitschritts dauert für gewöhnlich  $\mathcal{O}(100 \text{ ms})$  –  $\mathcal{O}(10 \text{ s})$  in Echtzeit.

Dazu muss der Zufallszahl-Generator, hier im weiteren Verlauf auch als RNG (*random number generator*) abgekürzt, auf die GPU portiert werden und einen eindeutigen *Seed*, also Startwert, haben. Bislang wird der Zufallszahl-Generator in jedem Zeitschritt für jeden Kernel-Aufruf neu initialisiert. Es wurde festgestellt, dass sich der Berechnungsschritt in Echtzeit dabei etwa 100-mal verlängert. Da das sehr ineffektiv ist, befindet sich derzeit ein anderer Ansatz in

Entwicklung. Der letzte Zustand des Zufallszahl-Generators kann auch gespeichert und beim nächsten Kernel-Aufruf geladen werden. Das nimmt einige 100 MB Speicherplatz im *Global Memory* der Grafikkarte in Anspruch, wodurch die Anzahl simulierbarer Teilchen pro GPU sinkt. Dennoch sollte ein deutlicher Geschwindigkeitsvorteil zu verzeichnen sein, da die Initialisierungszeiten eingespart werden.

Die Seeds sollten eineindeutig sein für:

- Den *MPI-Rank* (meist die ID der GPU relativ zur Gesamtanzahl der GPUs, die für die Simulation reserviert wurden)
- Die Zelle im gesamten Simulationsgebiet
- Die Spezies
- Den Zeitschritt
- Ionisation als Physikprozess (bzw. das Ionisationsmodell) in der Simulation

Das ist notwendig, um zu verhindern, dass *systematische Koinzidenzen* auftreten, die physikalische falsche Interpretationen nach sich ziehen könnten. Diese Effekte wären bei komplizierten PIC-Simulationen mit hoher Teilchendynamik kaum zu finden, könnten sich aber auf wichtige Ergebnisse auswirken. Daher muss auch der Zufallsgenerator getestet werden. Die zuverlässige und performante Generierung von Zufallszahlen auf GPUs ist auch erst ein sehr junges Forschungsgebiet [14].

## 4.4 Ionisations-Framework in PIConGPU

### 4.4.1 PIConGPU

PIConGPU ist ein *vollständig relativistischer 3D3V PIC-Code*, der auf hochparallelen Viel-Kern-Architekturen implementiert ist. Das Projekt wurde 2013 zusammen mit der Bibliothek libPMAcc veröffentlicht und wird vom HZDR gemeinsam mit dem Zentrum für Informationsdienste und Hochleistungsrechnen (ZIH) der TU Dresden weiterentwickelt. PIConGPU basiert auf der NVidia CUDA Bibliothek und wurde vollständig Open Source unter der GPLv3+ veröffentlicht. Weiterhin sind *modular* diverse Schemata zur Feldinterpolation und Strom-Extrapolation implementiert und Formfaktoren für Makroteilchen können wahlweise bis hin zur dritten Ordnung berücksichtigt werden.

Der Autor ist seit 2014 einer der Entwickler des Projekts.

### Mächtigkeit des Spezies-Konzepts

Vor Beginn jeder Simulation werden in der Datei `speciesDefinition.param` alle später auftretenden Teilchen-*Spezies* definiert. Das Konzept der Teilchenspezies ist sehr allgemein zu verstehen. PIconGPU unterstützt arbiträre Teilchendefinitionen, die erlauben, beliebige Attribute zur Compile-Zeit festzulegen. Teilchen können nicht nur anhand ihrer Eigenschaften und individuell während der Simulation verfolgt werden. Außerdem kann modular bestimmt werden, an welchen Wechselwirkungen die Spezies teilnehmen und mit welchen Formfaktoren sie repräsentiert sind. Neu benötigte Teilchenattribute sind frei definierbar. Die Spezies lassen sich so nach dem Bausteinprinzip beliebig vor der Simulation anpassen und während der Laufzeit ist ein Übergang in andere Spezies möglich. Das Speicher-Management geschieht für jede Spezies individuell und die Anzahl der Attribute kann sich zwischen Spezies unterscheiden. Somit ist PIconGPU um neue physikalische Modelle erweiterbar und erlaubt ebenfalls Strategien zur verbesserten Auswertung der Ergebnisse direkt in die Simulation einzubauen. Für die Feldionisation wurden Atom/Ion-Spezies mit folgenden Attributen implementiert:

- Welcher Teilchensorte die Spezies angehört
- mögliche atomare Konfiguration (Zahl von Protonen und Neutronen)
- Gewicht und Ladung relativ zum Elektron
- ob es ionisierbar ist und wenn ja, welches Modell verwendet werden soll
- welche Elektronenspezies bei der Ionisation verwendet werden soll
- wie die Ionisationsenergien der einzelnen Ladungszustände sind
- (noch nicht verwendet, aber implementiert) welche Quantenzahlen mit den Elektronen im jeweiligen Ladungszustand zu assoziieren sind

#### 4.4.2 Ablauf der Ionisation während eines Simulationsschritts

In jedem Zeitschritt wird vor dem *Push*, also dem Bewegen der Teilchen als Folge der Wirkung der elektromagnetischen Felder, der Ionisationsschritt ausgeführt (siehe Fig. 4.2). Dabei prüft die Routine für jede Spezies, ob sie ionisierbar ist und mit welchem Modell die Ionisation durchgeführt werden soll. Solchen Spezies (bspw. Elektronen), für die Ionisation nicht definiert wurde, wird bei der Abfrage automatisch das Ionisationsmodell `None` zugewiesen. Für Spezies, denen explizit ein Ionisationsmodell zugewiesen wurde, (auch `None` möglich) wird der Ionisations-*Kernel* auf der GPU gestartet. Mit einem *Kernel* wird eine Funktion bezeichnet, die parallel von mehreren Threads auf der GPU ausgeführt werden kann. Ein gutes Analogon für einen Kernel ist der Anweisungsteil einer Schleife. Auf der GPU werden dann die

einzelnen Durchläufe dieser Schleife den Threads zur Abarbeitung zugewiesen. Der Ionisations-Kernel sorgt für die Initialisierung des Ionisationsmodells, ist aber unabhängig vom explizit gewählten Modell und damit generisch. Seine Hauptaufgabe ist die dynamische Allokation von Speicher für die erzeugten Elektronen sowie deren Einordnung in Elektronen-Frames. Die neuen Elektronen-Frames werden an die bereits vorhandene Liste der Frames angehängt, die die übrigen Elektronen der Simulation enthalten. Im Anschluss an den *Kernel* werden teilgefüllte Frames, die durch die Elektronenerzeugung entstanden sein können, so aufgefüllt, dass nur das letzte Frame in der Liste nicht voll ist. Leere Frames werden wieder entfernt. All dies ist notwendig, da die Größe von Superzellen und Frames auf die Gegebenheiten der jeweiligen Hardware abgestimmt ist. Nur so arbeiten so viele Threads wie möglich parallel. Würde die Teilchenerzeugung bei der Ionisation sequentiell durch einen Thread stattfinden, so befänden sich alle anderen Threads im Leerlauf. Das wäre hochgradig ineffektiv.

Als Argumente werden dem Ionisations-*Kernel* die zu ionisierende und die Elektronenspezies mitgegeben. Außerdem erhält der Kernel das Ionisationsmodell (wie es *hostseitig* initialisiert wurde) und eine Abbildungsfunktion des Gitters und der Teilchen.

**Funktionsweise des *Kernels*:** Es folgt ein Programmablaufplan für den Ionisations-Kernel. Es ist zu beachten, dass alle Threads aus einem Thread Block die Anweisungen parallel ausführen. Alle Threads folgen demnach dem gleichen Ablaufplan, können aber zu unterschiedlichen Ergebnissen gelangen, da sie beispielsweise unterschiedlich viele Elektronen zu erzeugen haben. Die Herausforderung und zugleich jetzige Stärke der folgenden Implementation besteht darin, dass alle möglichen Ergebnisse bedacht werden und so wenig wie möglich sequentielle Ausführung stattfindet.

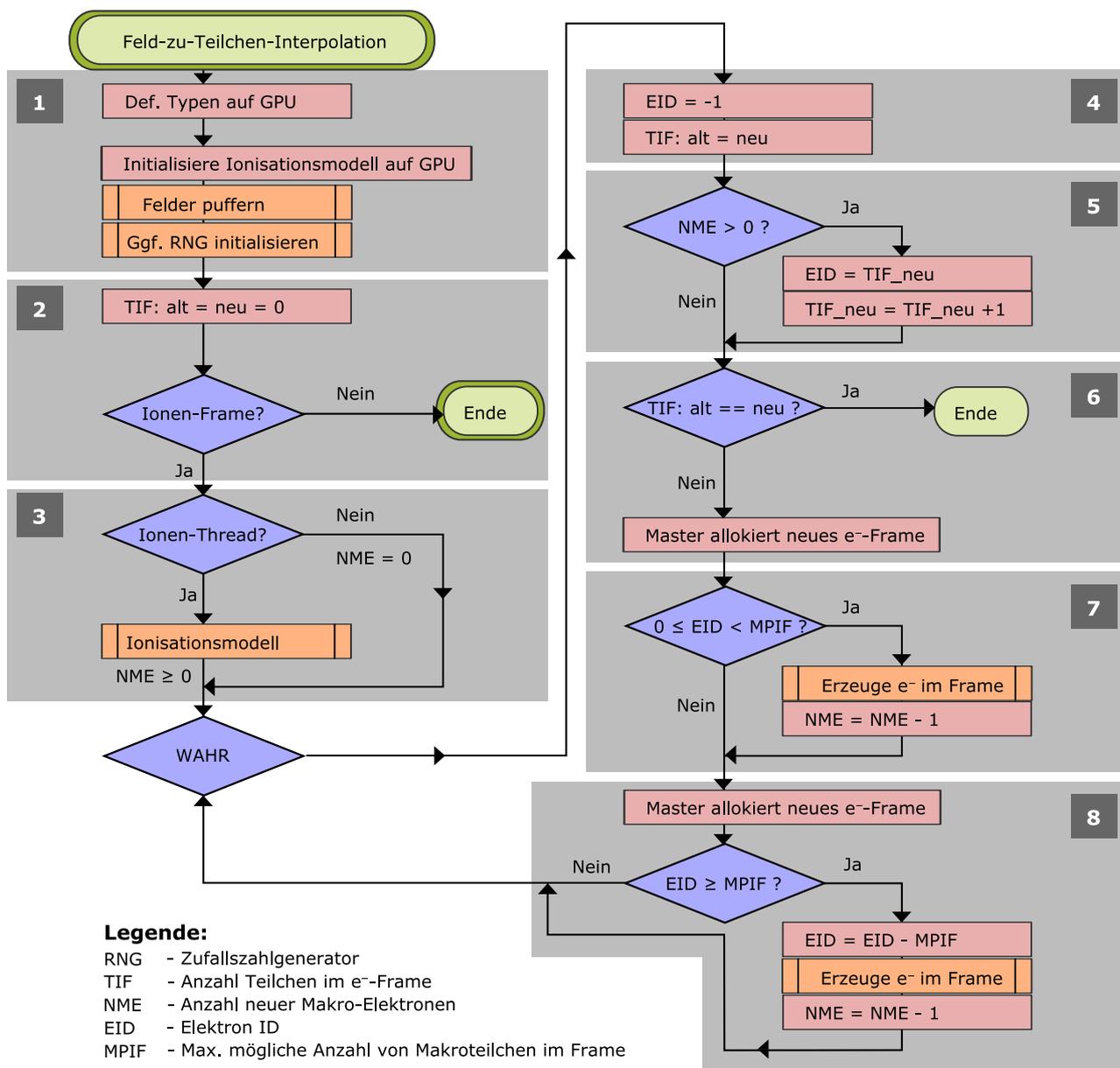


Abbildung 4.3: Programmablaufplan des Ionisationskernels, dem funktionalen Hauptbestandteil der Implementation von Feldionisation.

1. Zunächst werden notwendige Variablen und Typen der Teilchen-Frames, Feld-zu-Teilchen-Interpolation und Zell-Koordinaten auf der GPU definiert. Dazu wird die beim Kernel-Aufruf mitgegebene Abbildungsfunktion verwendet. Das Ionisationsmodell wird auf der Seite des *Devices*, also der GPU, initialisiert und damit werden die Felddaten der Superzelle *cached*. Das bedeutet, dass sie vom großen, aber langsamen *Global Memory* in den schnelleren *Shared Memory* kopiert werden, auf den alle Threads im Block zugreifen können. Falls nötig initialisiert das Ionisationsmodell zusätzlich einen Zufallszahl-Generator (siehe 4.3.1).

2. Es werden Zählvariablen im *Shared*-Speicher initialisiert, die später den alten und neuen Füllstand des Frames der erzeugten Elektronen enthalten. Dann wird eine *while*-Schleife über alle Frames gestartet, die Atome bzw. Ionen enthalten. Ein Durchlauf dieser Schleife ist in Abb. 4.3 dargestellt.
3. Falls ein Thread ein Makro-Ion bearbeitet, so wird das Ionisationsmodell aufgerufen. Dabei werden die zuvor interpolierten Felddaten verwendet. Als Ergebnis wird der Ladungszustand des Ions gegebenenfalls erhöht und die Zahl der zu erzeugenden Elektronen zurückgegeben.
4. Es wird eine Endlosschleife gestartet, die in jedem Durchlauf pro Makro-Ion nur ein Makro-Elektron produzieren kann. Alle Threads brechen nur gemeinsam aus dieser Schleife aus, wenn kein Thread mehr Photoelektronen zu erzeugen hat. Zu Beginn wird die Koordinate, die das neue Elektron im Frame haben wird, auf  $-1$  gesetzt. Threads, die keine Elektronen zu erzeugen haben, behalten diesen Wert und werden später beim Erzeugungsvorgang ignoriert. Außerdem wird der Wert des Füllstands des Elektron-Frames aus einem vorigen Schleifendurchlauf abgespeichert.
5. Alle Threads, die mindestens ein Elektron zu erzeugen haben, bekommen *nacheinander* den neuen Füllstand des Frames als Koordinate zugewiesen und erhöhen dann den Füllstand um 1.
6. Wenn gar keine Elektronen erzeugt werden sollen, brechen alle Threads gemeinsam aus der Endlosschleife aus. Anderenfalls allokiert ein einzelner *Master*-Thread den Speicher für ein neues Elektron-Frame. Der Master-Thread besitzt die Identifikationsnummer 0 und behandelt Variablen, die nur einmal und nicht in paralleler Ausführung gesetzt werden sollen.
7. Alle Threads, die Koordinaten erhalten haben, die kleiner als die Maximalgröße des Frames sind, erzeugen ein Elektron. Anschließend reduzieren sie ihre Zählvariable noch zu erzeugender Elektronen um 1.
8. Die übrigen Threads reduzieren nun ihre Koordinate um die Maximalgröße des Frames und erzeugen dann ebenfalls ein Makro-Elektron. Auch ihre Zählvariable zu erzeugender Elektronen wird um 1 herabgesetzt.  
Anschließend beginnt die Endlosschleife erneut.

Da diese allgemeine Erklärung schwierig zu verstehen ist, folgt hier ein hypothetisches Beispiel.

*Eine starke elektromagnetische Welle propagiert durch das Simulationsgebiet. Es wird eine Superselle von der Größe  $8 \times 8 \times 4 = 256$  Zellen betrachtet. Es befinden sich 500 Heliumatome*

in diesen Zellen. Unter dem Einfluss des elektromagnetischen Feldes werden die Heliumatome ionisiert. Dabei erreichen einige wenige den Ladungszustand  $+2$  und die große Mehrheit den Zustand  $+1$ . Da die Frame-Größe 256 Teilchen umfasst, gibt es 2 Ionen-Frames, wobei der zweite Frame nicht zur Gänze (mit nur 244 Heliumatomen) befüllt ist. Jeder Thread behandelt einen Eintrag im Frame und alle Threads beginnen beim teilgefüllten Frame. Die Threads, die ein zu ionisierendes Heliumatom behandeln, rufen das Ionisationsmodell auf und dabei wird der Ladungszustand des Heliums geändert. Alle Threads treten anschließend in die Endlosschleife ein. Durch die Einfachionisation sollen nun beispielsweise 240 Elektronen erzeugt werden. In einer sequentiellen Operation wird jedem dieser Threads die Koordinate zugewiesen, die das nachfolgend erzeugte Elektron im neuen Frame haben soll. Da die Anzahl der neuen Elektronen größer als 0 ist, wird durch den Master-Thread ein leeres Elektron-Frame allokiert. Es werden nun 240 Elektronen in dieses Frame eingeordnet. Da die Größe des Frames für alle Elektronen ausreichend war, wird der zweite Erzeugungsprozess ignoriert und alle Threads beginnen die Schleife von Neuem. Von den 240 einfach ionisierten Heliumatomen, wurden 30 Atome im gleichen Zeitschritt zweifach ionisiert. Der alte Füllstand des allokierten Elektronframes betrug 240 von maximal 256 Teilchen. Von den 30 neu zu erzeugenden Elektronen, werden infolge des ersten Erzeugungsprozesses noch 16 Elektronen in das Frame gefüllt. Anschließend allokiert der Master-Thread ein weiteres Frame und im zweiten Erzeugungsprozess werden die restlichen 14 Elektronen in das neue Frame sortiert. Im nächsten Durchlauf der Endlosschleife muss keiner der Threads weitere Elektronen erzeugen und so brechen alle Threads aus der Endlosschleife aus. Daraufhin wird das weitere, vollständig gefüllte Frame von Heliumatomen auf gleiche Weise behandelt.

Es ist wichtig, dass stets alle Threads im Block die gleiche Schleife durchlaufen, da nach Speicherzugriffs-Operationen (wie dem Erhöhen der Füllstandsvariablen im *Shared*-Speicher oder dem Erzeugen von Elektronen) alle Threads synchronisiert werden müssen, damit die Variablen im *Shared*-Speicher für jeden Thread den gleichen Wert haben. Es muss vermieden werden, dass Threads mit unterschiedlichen Werten rechnen und dadurch in ihrem Verhalten *divergieren*. Sollte so eine *Thread-Divergenz* eintreten, können große numerische Fehler durch falsche Speicherzugriffe entstehen, die den Kernel zum Absturz bringen.

Mehrfachionisation wird zwar vom Kernel (siehe Punkt 3 im Programmablaufplan) unterstützt, wurde aber von Seiten der Modelle noch nicht implementiert. Man müsste nicht nur die Wahrscheinlichkeit ausrechnen, in den nächsten Zustand zu ionisieren, sondern sollte alle möglichen Ladungszustände mit in Betracht ziehen und die entsprechenden Übergangswahrscheinlichkeiten beispielsweise mithilfe der Markov-Kette (Abschn. 4.2.3) berechnen. Die Möglichkeit der dynamischen Unterteilung eines Zeitschritts, welches dieses Vorgehen benötigt, befindet sich parallel zu dieser Arbeit in Entwicklung <sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup>Implementation durch R. Pausch, private Kommunikation

### 4.4.3 Vorteile und Erweiterbarkeit des geschaffenen Frameworks

Das während der Arbeit geschaffene Framework zur Erzeugung neuer Teilchen ist weitgehend unabhängig vom physikalischen Modell der Ionisation. Der Kernel, der die Einordnung der zu erzeugenden Teilchen in Listen vornimmt, orientiert sich ausschließlich an der Anzahl, die ihm von jedem Thread mitgeteilt wird. Dadurch kann das Konzept auch in leichter Abänderung beispielsweise dazu verwendet werden, Bremsstrahlung<sup>2</sup> und Rekombination zu modellieren.

#### Verwendung verschiedener Modelle bei unterschiedlichen Spezies

Eine weitere, wichtige Fähigkeit des Frameworks besteht darin, dass unterschiedliche Teilchenspezies auch mit unterschiedlichen Ionisationsmodellen ionisiert werden können. Da dem Ionisationsmodell auch Elektronen- oder allgemeiner *Ziel-Teilchen-Spezies* als Argument mitgegeben werden kann, ist es auch vorstellbar für jedes Ionisationsmodell oder jede Ionen-Spezies unterschiedliche Elektronenspezies zu definieren, um diese später während der Simulation einzeln verfolgen zu können. So können mehrere Modelle in der gleichen Simulation einem *Benchmark*-Test unterzogen werden. Dadurch können beispielsweise die Unterschiede zwischen Modellen, die Ionisation von wasserstoffähnlichen Ionen beschreiben mit Modellen, die auf beliebige Ionen anwendbar sind, verglichen werden. Andererseits könnten beliebige Ionen nach der Ionisation in den wasserstoffähnlichen Zustand (nur noch ein *1s*-AußenElektron) in eine neue Spezies wechseln, die ein für diesen Zustand angepasstes Ionisationsmodell enthält.

#### Kombination mehrerer Ionisationsmodelle

Ein einzelnes Ionisationsmodell kann weder den gesamten Bereich der Ionisationseffekte abdecken, noch ist es wohl ausreichend für alle möglichen Atomkonfigurationen und Bedingungen im Plasma. Die Arbeit [8] hat gezeigt, dass bereits deutliche Unterschiede zwischen verschiedenen Modellen existieren können, die das Regime der Tunnelionisation abdecken. Es ist daher naheliegend, dass eine gute Repräsentation des realen Systems, sofern die Modelle *validiert* worden sind, nur über eine Kombination mehrerer Ionisationsmodellen erreicht werden kann. Aus diesem Grund wurde das Ionisations-Framework so implementiert, dass in einer späteren Erweiterung<sup>3</sup> mehrere Modelle nacheinander ausgeführt werden können.

## 4.5 Methodik zur Verifikation der Implementierung

Das Ziel dieses Abschnitts ist es zu erläutern, wie die Tests für diese Arbeit entwickelt wurden, um möglichst das Verhalten der Implementation in Bezug auf die wichtigen Parameter der Io-

<sup>2</sup>Anwendung und Weiterentwicklung durch H. Burau, private Kommunikation

<sup>3</sup>Adaption einer Programm-Struktur nach R. Widera, private Kommunikation

nisation (3.4), des PIC-Algorithmus (4.1.1) sowie des Plasmas (4.2.1) zu prüfen. Dabei wurde zunächst die Idee verfolgt, Tests steigender Komplexität zu entwerfen und zu Beginn so viele Parameter wie möglich konstant zu halten. Der Einfluss einzelner Parameter wird dann geprüft und das Wissen um deren Einfluss wird daraufhin genutzt, um den Einfluss des nächsten Parameters in einem komplexeren Test zu isolieren. Die in dieser Arbeit durchgeführten Tests wurden unter Ausschluss jeglicher Teilchendynamik ausgeführt. Diese wäre bei der Verifikation des Ionisationsmodells störend, da unter anderem Elektronenanzahlen im Gitter beobachtet werden und Teilchenbewegungen durch elektrische Felder die Ergebnisse überlagern würden. Die Betrachtung vieler einzelner Atome ist der Verifikation dagegen dienlich, da auch das ADK-Modell 3.3.3 auf der Basis eines einzelnen Atoms im quasistatischen elektrischen Feld herleitet wurde.

Alle Tests, die in dieser Arbeit durchgeführt wurden, haben folgende Eigenschaften gemeinsam:

- *Maxwell-Solver* (Fig. 4.1 Schritt 4) sind deaktiviert - es findet keine Wellenpropagation statt
- ⇒ ein rein elektrisches *Hintergrundfeld* ist aktiv (wie Annahme des ADK-Modells)
- *Particle Pusher* (Fig. 4.1 Schritt 2) sind deaktiviert - Teilchen werden nicht bewegt
  - *Current Deposition* (Fig. 4.1 Schritt 3) ist deaktiviert - Teilchen können nicht auf die Felder rückwirken
  - Dimensionalität des Simulationsgebiets: 2D

Die Gewichtsfunktion  $w$  der Makroteilchen ist auch ohne Einfluss, da die Simulationen einerseits frei von der Strom-Deposition (Fig. 4.1 Schritt 3) sind und andererseits Kollisionen keine Rolle spielen (siehe Vlasov-Glg. (4.2) für kollisionslose Plasmen:  $(\partial f / \partial t)_{\text{Stöße}} = 0$ ). Makroteilchen können innerhalb der folgenden Tests mit echten Teilchen identifiziert werden.

### 4.5.1 Zeitabhängigkeit des Ionisationsgrades bei konstanter elektrischer Feldstärke

#### Testaufbau

Im ersten Test soll gezeigt werden, dass das implementierte ADK-Modell (siehe Glg. 3.15) die erwartete Ionisationswahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Zeit reproduziert. Diese wird durch den Ionisationsgrad einer großen Anzahl von Wasserstoff-Atomen repräsentiert. Physikalisch wird dieser Test durch den Umstand gerechtfertigt, dass elektromagnetische Laserfelder zeitlich sehr stark variieren. Bevor allerdings das Feld zeitlich variiert werden kann, sollte verifiziert werden, dass die zeitliche Abhängigkeit bei konstantem Feld den Erwartungen

entspricht. Wasserstoff ist das quantenmechanisch am einfachsten zu beschreibende System und daher sollte die Implementation zuerst darauf getestet werden. Es folgt eine Auflistung der konstanten und variierten Größen in diesem Test.

- **konstant:**

$$\mathcal{E} = 0,5 \text{ AU}$$

$$Z = 1$$

$$\Delta t_{\text{PIC}} = 4,134 \text{ AU}$$

$$N_{\text{PIC-Schritte}} = 2000$$

$$\vec{E}(t) = E_z = 7,5 \cdot 10^{-2} \text{ AU}$$

Das Ionisationspotential  $\mathcal{E}$  ist der Wert für das Wasserstoffatom. Der gewählte Wert des elektrischen Feldes liegt unterhalb der BSI-Feldstärke  $E_{\text{BSI}}^{\text{BM}} = 1,46 \cdot 10^{-1} \text{ AU}$  (Glg. (3.9) nach Bauer und Mulser unter Berücksichtigung des Stark-Effekts für Wasserstoff) und somit im Tunnelregime.

- **variieren:** Größe der *statistischen Grundgesamtheit*

Anzahl Makroteilchen:  $2^{10} \dots 2^{22}$  (etwa  $1 \cdot 10^3 \dots 4,2 \cdot 10^6$ ) in 20 Simulationen

Um die Anzahl der Makroteilchen in der Simulation zu variieren, wurde bei jeder Simulation die Gittergröße in der entsprechenden Konfigurationsdatei (bspw. `submit/0008gpus.config`) verändert.

```
# Größe des Simulationsgebietes in N_{Z,x} * N_{Z,y} Zellen
TBG_gridSize="-g 2048 1024"
```

Die Anzahl der Makroteilchen in der Simulation kann wie folgt ermittelt werden:

$$N_{\text{MT}} = N_{Z,x} \cdot N_{Z,y} \cdot N_{Z,z} \cdot N_{\text{MTPZ}} \quad (4.11)$$

Dabei bezeichnen die  $N_{Z,i}$  die Anzahl der Zellen in der Dimension  $i \in \{x, y, z\}$  und  $N_{\text{MTPZ}}$  die Anzahl der Makroteilchen pro Zelle. Es ist möglich, Makroteilchen zu Beginn der Simulation zufällig verteilt zu initialisieren. Die Größe  $N_{\text{MTPZ}}$  ist dann nur der Mittelwert für die Anzahl der Makroteilchen pro Zelle. In den Tests dieser Arbeit werden die Teilchen jedoch gleichverteilt im Raum initialisiert, um mögliche Fehler der Generierung von Zufallszahlen anhand der Ionisation finden zu können.

### Fragestellung

- 1 *Wie nah liegt der simulierte Ionisationsgrad des Wasserstoffs am erwarteten Wert (identifiziert durch die Ionisationswahrscheinlichkeit  $P_{\text{ADK}}$ )?*

## 2 Ist das Seeding des Zufallsgenerators gut genug?

Der Begriff *Seeding* bezeichnet die Ermittlung von Anfangswerten für die Initialisierung des Zufallszahl-Generators. Die *Seeds* (Anfangswerte) sind von hoher Güte, wenn es nicht zur systematischen Wiederholung der gleichen Abfolge von Pseudo-Zufallszahlen des RNG kommt, die durch das Auftreten von regelmäßigen “Mustern” erkennbar wäre.

### Erwartung

Der Test wird als erfolgreich angesehen, wenn die Abweichung des simulierten Ionisationsgrades von der theoretischen Erwartung weniger als 10% beträgt. Die Berechnung der Ionisationswahrscheinlichkeit für jedes einzelne Makroteilchen folgt:

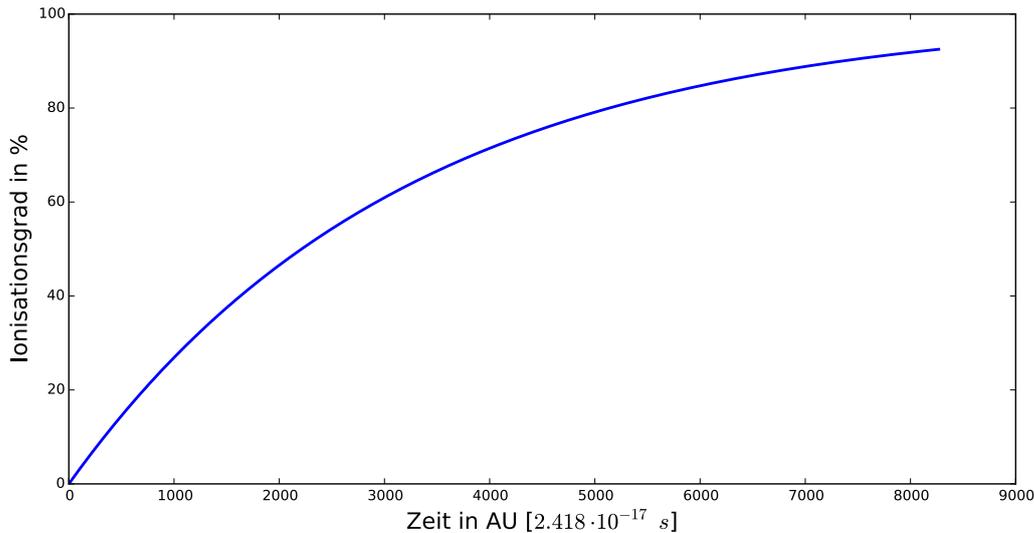
$$P = \Gamma \cdot \Delta t \qquad \Gamma \text{ .. Ionisationsrate} \qquad (4.12)$$

Dieses Vorgehen ist dadurch begründet, dass es immer noch Gegenstand aktueller Forschung ist [17], ob der quantenmechanische Tunnelprozess mit einer reellen Zeitdauer identifiziert werden kann. Adversativ bestehen aktuell Zweifel [12] daran, dass die weitgehend in PIC-Codes adaptierte Berechnung (4.13) korrekt ist. Diese setzt voraus, dass die Wahrscheinlichkeit wie die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen quantenmechanischen Zuständen in einem Zwei-Niveau-System berechnet werden kann. Somit würde Feldionisation als Poisson-Prozess betrachtet.

$$P = 1 - \exp(-\Gamma \cdot t_{\text{Ges}}) \qquad (4.13)$$

Das Problem an dieser Betrachtungsweise ist, dass sie das Viel-Niveausystem der Atomorbitale zu sehr vereinfacht. In Ermangelung einer definitiven Antwort auf diese Frage wurden beide Ansätze als gleichwertig erachtet und die in Abschnitt 3.3.3 motivierte Formel (3.25) implementiert.

Da in der Simulation die Teilchenanzahl jedoch endlich ist und die Anzahl der Zeitschritte relativ groß, wird erwartet, dass sich der Ionisationsgrad  $N_e/N_H$  des Wasserstoffs verhält, wie die Wahrscheinlichkeit  $P_{i \rightarrow i+1}$  in Glg. (4.13). Die Simulation führt jedoch Monte-Carlo-Prozesse aus und könnte nur bei einer unendlich großen Grundgesamtheit dem exakten Erwartungswert folgen. Es wird daher außerdem erwartet, dass die Abweichung des Ionisationsgrades vom Erwartungswert mit der Anzahl der Teilchen abnimmt.



**Abbildung 4.4:** Ionisationsgrad von H-Atomen - Theoretische Erwartung identifiziert durch Ionisationswahrscheinlichkeit  $P_{\text{ADK}}$  in Abhängigkeit von der Zeit.

Die Simulationsparameter wurden so gewählt, dass sie dem Gültigkeitsbereich des ADK-Modells (siehe Tab. 3.3) entsprechen und die maximal in der Simulation erwartete Ionisationswahrscheinlichkeit noch unterhalb 100 % liegt.

Die zu erwartende Beobachtung bezüglich eines fehlerhaften Seeds wären sich wiederholende, identische “Muster”. Diese könnten in einer 2D-Darstellung der Elektronendichte über dem Simulationsgebiet sichtbar werden.

#### 4.5.2 Signifikanztest der Verteilung um den Erwartungswert

Es soll in einem nächsten Test geprüft werden, welcher Verteilung die Streuung des diskret erreichten Ionisationsgrades einer vergleichbar mit der Gesamtanzahl aller Teilchen in der Simulation kleinen Anzahl Makroteilchen um den Erwartungswert folgt. Dieser Test wird physikalisch durch den Umstand motiviert, dass gewichtete Makroteilchen zur Repräsentation mehrerer 100 realer Teilchen verwendet werden und dadurch automatisch Samplingfehler entstehen. Zu diesem Zweck werden Teilchenanzahlen von 2 bis 800 Makroteilchen als Systemgrößen für ein Zufallsexperiment gewählt. Es wurden mehrere Simulationen mit unterschiedlichen initialen Seeds des Zufallszahlgenerators so aufgesetzt, dass für jede Systemgröße gleich viele statistisch unabhängige Zufallsexperimente aus den Daten extrahiert werden können. Dieses Vorgehen wird durch die Fragestellung motiviert:

*Wie genau wird eine reale Ladungszustandsverteilung durch eine diskrete Anzahl gewichteter Makroteilchen approximiert?*

Diese Frage und die Frage nach der Größe des Fehlers der Ladungsdichte in Abhängigkeit von der Ortsauflösung  $\Delta x$ , soll hier nicht komplett gelöst werden. Sie ist allerdings zurückführbar auf die Frage nach der Verteilung, der die Ionisation in der Implementation in PIconGPU

folgt.

### Hypothese

*Die erwartete Verteilung für die Ionisation ist eine Binomialverteilung.*

Diese Erwartung kann durch folgende drei Merkmale eines Binomialprozesses begründet werden:

- Für jedes Teilchen ist nur eine binäre Entscheidung möglich:  
ionisiert oder nicht ionisiert
- Die Wahrscheinlichkeit bleibt konstant, da die Ionisationsrate in einem PIC-Schritt ebenfalls konstant ist, denn  $Z$ ,  $E$ , und  $\Delta t$  ändern sich nicht (gilt so lange Mehrfachionisation nicht implementiert wurde)
- Die Ionisationswahrscheinlichkeit hängt nur vom aktuellen Zustand ab (siehe Markov-Prozess 4.2.3)

### Testszenario

Es soll ein  $\chi^2$ -Signifikanztest durchgeführt werden, um zu testen, ob sich die durch die Simulation erhaltene Verteilung der Ionisationserfolge  $k$  um den Erwartungswert der Verteilung  $p$  durch eine berechnete Verteilung approximieren lässt. Die Binomialverteilung wird durch die Simulationsgrößen wie folgt repräsentiert.

$$\mathcal{B}_{n,p}(k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k} \quad (4.14)$$

$n$  .. Anzahl der Makroteilchen im System

$p$  .. th. Erwartungswert der Ionisationswahrscheinlichkeit durch ADK – Modell

$k$  .. Anzahl ionisierter Makroteilchen im System

Die Simulationsparameter sind identisch mit denen des vorherigen Tests, abgesehen von der Anzahl der Zeitschritte und der Länge des PIC-Zeitschritts.

- **variieren:**

$$n = [2, \dots, 800]$$

$\Rightarrow$  approximieren mit dem Beispiel aus 4.2.2

$$n_{\text{real}} = [2,5 \cdot 10^2, \dots, 1,2 \cdot 10^5] \text{ reale Teilchen}$$

auf den Längenskalen von  $1/5$  bis  $1 \lambda_{\text{Laser}}$

$$\Delta t_{\text{PIC}} = [0,1, 1, 10, 100] \text{ AU}$$

$$\Rightarrow P_{\text{ADK}} = [3,13 \cdot 10^{-5}, 3,13 \cdot 10^{-4}, 3,13 \cdot 10^{-3}, 3,08 \cdot 10^{-2}]$$

Obwohl die Simulationen 5 Zeitschritte durchlaufen, ist nur der jeweils erste von Bedeutung für diesen Test. Das Simulationsgebiet beträgt  $2048 \times 1024$  Zellen. Pro Zelle werden  $N_{\text{MTPZ}} = 2$  Makroteilchen initialisiert. Für die Systemgröße von  $n = N_{\text{MTPZ}}$  Makroteilchen stellt jede Zelle ein statistisch unabhängiges Zufallsexperiment dar. Die nächsten Experimente ergeben sich durch die Anzahl der  $n$  Makroteilchen in  $(2 \times 2)$ ,  $(3 \times 3)$ ,  $\dots$ ,  $(20 \times 20)$  Zellen. Es müssen folglich ausreichend Simulationen gestartet werden, um für jede Systemgröße  $2048 \times 1024 = 2097152$  Einzelexperimente  $N_{\text{Exp}}$  zu erhalten. Diese große Zahl von Experimenten ist notwendig, um auch kleine Ionisationswahrscheinlichkeiten von  $3 \cdot 10^{-5}$  abbilden zu können. Es wird die Häufigkeit der Ionisationserfolge  $k$  für jede Systemgröße  $n$  gezählt und diese bilden die Bins der Verteilung (4.14). Um jedoch einen  $\chi^2$ -Test ausführen zu können, müssen die kumulierten Verteilungen gebildet werden. Zur Auswertung wird die theoretisch erwartete, kumulierte Binomialverteilung berechnet und in dem Test mit der über die Zufallsexperimente erhaltenen Verteilung verglichen.

### Erwartung

Sollte die Verteilung binomialverteilt sein, so wäre eine Vorhersage für zukünftige Simulationen möglich, inwieweit die durch Makroteilchen auf einem Gitter repräsentierte und durch Ionisation erzeugte Elektronendichte von einer zu erwartenden Elektronendichte abweicht.

Ausblickend könnte eine Abschätzung der erwarteten Elektronendichte durch die Elektronentemperatur  $T_e$  im Plasma oder das Ponderomotive Potential  $U_p$  erfolgen. Dann könnte die notwendige Ortsauflösung  $\Delta x_{\text{PIC}}$  ermittelt werden und damit würde sich das *weighting*  $w$  ergeben. Das wäre zukünftig ein wichtiger Bestandteil der Fehlerabschätzung auf das örtliche Sampling der Elektronendichte.

### 4.5.3 E-Feld-Abhängigkeit der Ionisationsrate

Es soll nun getestet werden, ob die Implementation des ADK-Modells auch die Abhängigkeit der Ionisationsrate vom äußeren elektrischen Feld  $E$  wiedergeben kann. Dazu wird wieder ausgenutzt, dass ohne Teilchendynamik und Rückwirkung der Teilchenladung auf das Feld (*current deposition*) alle Teilchen voneinander statistisch unabhängig ionisiert werden. Das elektrische Hintergrundfeld wird für die Simulation so manipuliert, dass es nur konstant über alle Zellen in  $x$ -Richtung des Gitters ist. In  $y$ -Richtung wird ein Feldgradient mit konstantem Anstieg eingestellt. Da jeder Austausch zwischen benachbarten Zellen deaktiviert wurde, kann jede Zellreihe in  $x$ -Richtung als Zufallsexperiment zu einem festen E-Feld-Wert betrachtet werden und damit zu einer festen Ionisationswahrscheinlichkeit. Um nun die Ionisationsrate testen zu können, muss diese numerisch bestimmt werden.

$$\Gamma_{\text{num}} = \frac{N_e}{N_H \cdot N_{\text{Schritte}} \Delta t_{\text{PIC}}} \quad (4.15)$$

Zwischen verschiedenen Simulationen werden andere Zeitschritt-Dauern  $\Delta t_{\text{PIC}}$  verwendet, was ebenfalls aufgrund von Glg. 4.12 die Wahrscheinlichkeit zur Ionisation ändert.

- **variieren:**  $E = E(y) = [0, \dots, 1]$  AU
- **konstant:**  $\Delta t_{\text{PIC}}$  von  $1 \cdot 10^{-3}$  AU bis  $5 \cdot 10^1$  AU  
in 10 Schritte von je einer halben Größenordnung der Zeit

Die Gittergröße beträgt in diesem Test  $4096 \times 2048$  Zellen. Mit  $N_{\text{MTPZ}} = 2$  wird  $P_{\text{num}}$  also für jeden E-Feld-Wert über 8192 Makroteilchen gemittelt. **Erwartung**

Aus physikalischer Sicht ist die Ionisationsrate zeitunabhängige Größe für einen Zustand, in dem sich die Parameter nicht oder nur unmerklich ändern. Es wird jedoch vermutet, dass numerische Effekte sichtbar werden, bei der die diskrete Abtastung der Zeit eine Rolle spielt.

Bei diesem Testszenario fällt besonders auf, dass auch Zeiten deutlich unter einer atomaren Einheit gewählt wurden. Dies wird jedoch von Tunnelionisationsmodellen nicht explizit verboten.

#### 4.5.4 Ladungszustandsverteilung bei linear wachsendem E-Feld

Nachdem bisher das E-Feld konstant gehalten wurde und stattdessen die Teilchenanzahl und die Zeitschrittlänge variiert wurden, kann eine Stufe der Komplexität hinzugefügt werden. Feldionisation wurde implementiert, weil sie ein wichtiger Effekt zur Modellierung hoch intensiver Laser mit Materie ist. Physikalische Laserfelder variieren stark in der Zeit. Als erste Approximation soll für alle Makroteilchen auf dem Gitter ein homogenes elektrisches Hintergrundfeld mit fortschreitender Zeit linear wachsen. Dabei soll das Auftreten der Ladungszustände bei Neon-Atomen beobachtet werden. Folgende Simulationsparameter wurden im Detail konfiguriert.

- **konstant:**

$$\mathcal{E} = 1,6 \text{ AU bis } 100,2 \text{ AU siehe Tab. 3 4}$$

$$Z = 10$$

$$\Delta t_{\text{PIC}} = [1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \frac{1}{5}] \times 2,576 \cdot 10^{-1} \text{ AU}$$

$$N_{\text{PIC-Schritte}} = [10 \dots 50]$$

- **variieren:**

$$E(t) \text{ mit } \frac{\Delta E}{\Delta t} = \frac{6}{N_{\text{PIC-Schritte}}} \text{ AU} \quad (4.16)$$

Wie bereits in der Arbeit [8] gezeigt wurde, weisen Tunnelionisationsmodelle unphysikalische Eigenschaften auf, falls sie außerhalb der physikalisch sinnvollen Bereiche angewendet werden. Dieses Verhalten soll in diesem Test qualitativ gezeigt und ein Gefühl für die nötige Abtastrate eines wachsenden E-Feldes gegeben werden. Die Zeit wurde so gewählt, dass die gesamte Simulationszeit einer Viertel-Periode einer 800 nm-Laserwelle umfasst. Somit soll ein Szenario eines unter-relativistischen Laserpulses mit etwa  $8,8 \cdot 10^{17} \text{ W/cm}^{-2}$ , angedeutet werden. Damit beschreiben die Simulationsparameter eine weniger extreme Situation, als das Beispiel in Abschnitt 3.4. Neon wurde als atomare Spezies ausgewählt, da es ein einatomiges Gas ist, also im Hinblick auf zukünftige Validierung mit experimentellen Ergebnissen keine Moleküldynamik beachtet werden muss. Neon kann bis zu 10-mal ionisiert werden und für die Simulationsparameter dieses Tests wird mithilfe des BSI Modells mindestens ein Ladungszustand von +6 erwartet. Es existieren auch Experimente zur Tunnelionisation, bei der Edelgas-Atome verwendet wurden [34]. Die für den Ionisationsprozess interessanten Zeitskalen werden derzeit in Experimenten durch *Atto-Clock*-Techniken in Jena untersucht [35]. Mit *Attoclock / Atto-Uhr* wird die experimentelle Methode bezeichnet, bei der ein ultrakurzer ( $T_{\text{Puls}} = 2,4 \text{ fs}$ ), nahezu zirkular polarisierter Laser Photoelektronen ablenkt. Die Laserperiode wird dabei so gewählt, dass der transversale elektrische Feldvektor  $\vec{E}$  wie der Minutenzeiger einer Uhr innerhalb einer Periode  $360^\circ$  überstreicht. So kann ohne Attosekunden-Pulse der Ionisationszeitpunkt auf Attosekunden-Genauigkeit bestimmt werden, da die Zeit über den Winkel des Photoelektronen-Impulses mit der Polarisationssebene abgebildet wird.

### Erwartung

Es ist anzunehmen, dass die Ladungszustandsverteilung in der Simulation besonders bei geringer Abtastrate deutlich von der theoretisch erwarteten Verteilung abweichen wird, da der Feldverlauf mit geringer Auflösung modelliert wird. Der Gültigkeitsbereich des ADK-Modells 3.3.3 liegt außerdem für jeden Ladungszustand aufgrund der unterschiedlichen Ionisationsenergien in einem anderen Bereich des elektrischen Feldes. Es könnte daher durch das von Bauer und Mulser [3] beschriebene Absinken der ADK-Ionisationsrate oberhalb von BSI-Feldstärken dazu kommen, dass unphysikalische Resultate beobachtet werden.

### Theoretische Vorhersage

Die Ladungszustandsverteilung für die theoretische Erwartung wurde mittels des Markov-Ketten-Ansatzes aus Abschnitt 4.2.3 in Python erzeugt.

## 4.5.5 Ladungszustandsverteilung bei exponentiell wachsendem E-Feld

Ähnlich dem Test zuvor mit konstantem E-Feld-Gradienten soll nun das Auftreten von Ladungszuständen des Neons bei einem exponentiellen Anstieg des Feldes untersucht werden. Die Gesamtzeit der Simulation entspricht erneut einer Viertel-Periode einer 800 nm-Laser-Welle. Das Hauptaugenmerk soll vor allen Dingen darauf gelegt werden, zu welchem Zeitpunkt die

Ladungszustände im Vergleich zu Erwartung auftreten und welcher der maximal erreichte Ladungszustand ist.

Die zeitliche Entwicklung des elektrischen Feldes entspricht einem Gauß-Puls, der von  $E_{t_0} = 2,6 \cdot 10^{-4}$  AU bis  $E_{\max} = 5$  AU wächst. Der Test ist so angelegt, dass der Grundzustand des Neons stets mit hoher Wahrscheinlichkeit ionisiert wird, da die oberen Ladungszustände von Interesse sind.

#### 4.5.6 Überblick über Szenarien und Testparameter

Nr.	konst.	variiert	getestete Größe	beobachtet durch
1	$\mathcal{E}$ , $\Delta t_{\text{PIC}}$ , $E(t)$ , $Z_{\text{H}}$	Gitter-Dim., $N_{\text{H}}$	$P_{\text{ADK}}(t_{\text{Ges}})$	$\frac{N_{\text{e}}}{N_{\text{H}}}$
2	$\mathcal{E}$ , $E(t)$ , $Z_{\text{H}}$	$\Delta t_{\text{PIC}}$ , $N_{\text{H, System}} = n$	$\mathcal{B}_{n,p}(k_{\text{ionisiert}})$	$\chi^2(f(n, P_{\text{ADK}}, k_{\text{ion.}}))$
3	$\mathcal{E}$ , $E(t)$ , $Z_{\text{H}}$ , $N_{\text{H}}(E)$	$E(y)$ , $\Delta t_{\text{PIC}}$	$\Gamma_{\text{ADK, th}}(E)$	$\Gamma_{\text{ADK, num}}(E) _{\Delta t_{\text{PIC}}}$
4	$\mathcal{E}$ , $Z_{\text{Ne}}$ , $N_{\text{Ne}}$	$\frac{\Delta E}{\Delta t} = \text{const}$ $\Rightarrow E(t)$ linear wachsend, $\Delta t_{\text{PIC}}$	$\frac{N_{i+}}{N_0}(t)$	$\frac{N_{i+}}{N_0}(t)$
5	$\mathcal{E}$ , $Z_{\text{Ne}}$ , $N_{\text{Ne}}$	$E(t)$ gaußförmig, $\Delta t_{\text{PIC}}$	$\frac{N_{i+}}{N_0}(t)$	$\frac{N_{i+}}{N_0}(t)$



# 5 Ergebnisse und Interpretation

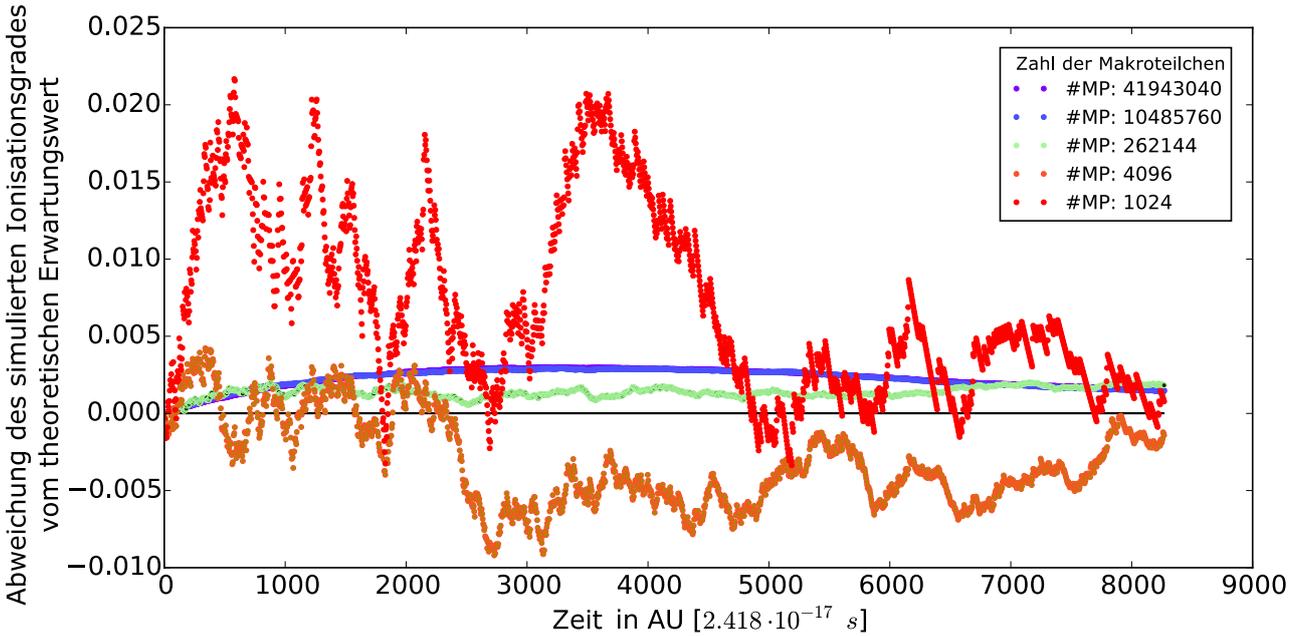
Dieses Kapitel dient der Beschreibung der Beobachtungen, die bei der Durchführung der Tests aus den Sektionen 4.5.1 bis 4.5.5 gemacht wurden. Des Weiteren werden Rückschlüsse in Bezug auf die Güte der Implementation der Tunnelionisation gezogen. In diesem Kapitel werden die Wörter *Teilchen* und *Makroteilchen* synonym verwendet, da bei deaktivierter Wirkung der Felder (*current deposition*), die durch geladene Teilchen erzeugt werden, die Gewichtsfunktion (*weighting*) der Makroteilchen ohne Einfluss ist. (Siehe 4.1)

## 5.1 Zeitabhängigkeit des Ionisationsgrades von Wasserstoff

Der erste Test (siehe Abschnitt 4.5.1) simuliert  $N_{\text{H}}$  Makro-Wasserstoff-Atome auf einem Gitter, die alle der gleichen, über die Zeit konstanten Ionisationsrate unterliegen. Es wird geprüft, ob die beobachtete relative Häufigkeit ionisierter H-Atome  $N_{\text{H}^+}/N_{\text{H}}(t)$  mit der über die Zeit wachsenden, theoretischen Ionisationswahrscheinlichkeit  $P_{\text{ADK}}(t)$  übereinstimmt. Im Folgenden soll

$$D_{\text{H}} = \frac{N_{\text{H}^+}}{N_{\text{H}}} = \frac{N_{\text{e}^-}}{N_{\text{H}}} \quad (5.1)$$

als *Ionisationsgrad*  $D_{\text{H}}$  bezeichnet werden. Idealerweise sind Ionisationsgrad und -Wahrscheinlichkeit zu jedem Zeitpunkt identisch. Die Differenz der beiden Größen ist in Abb. 5.1 über die Zeit in AU aufgetragen.



**Abbildung 5.1:** Abweichung des simulierten Ionisationsgrades  $D_H$  vom theoretischen Erwartungswert  $P_{ADK}(t)$  am Beispiel von Wasserstoff. Die Simulationen laufen für 2000 Zeitschritte mit  $\Delta t_{PIC} = 4,134$  AU.

Abbildung 5.1 zeigt eine Auswahl der insgesamt 20 Simulationen bei der die Anzahl der Makro-Atome variiert wurde. Es wurden nur 5 Simulation für die Darstellung gewählt, da sie bereits alle Besonderheiten der 20 Kurvenverläufe zeigen. Zunächst fällt auf, dass alle Abweichungen von der theoretischen Erwartung (siehe Abb. 4.4) im Bereich unterhalb von 2,5 % liegen. Damit wurde die festgesetzte Genauigkeitsgrenze von 10 % unterschritten und der Test ist als erfolgreich zu werten. Die dargestellten Kurven repräsentieren Simulationen mit 1000 bis 50 Millionen Makroteilchen und zeigen einen sehr unterschiedlichen Verlauf. Es zeigte sich, dass für sehr große Teilchenzahlen  $N_H > 5 \cdot 10^5$  die Abweichung von  $D_H$  gegenüber  $P_{ADK}$  ausschließlich ein positives Vorzeichen aufweist. Das bedeutet, dass die Simulation die theoretische Vorhersage über die Anzahl stattgefundener Ionisationen überschätzt. Die maximale Abweichung der Simulationen mit über 10 Millionen Teilchen beträgt etwa 0,3 %. Zu Beginn und gegen Ende der Simulation strebt die Abweichung gegen Null. Die Kurven weisen außerdem einen sehr glatten Verlauf auf.

Der glatte Verlauf kann dadurch erklärt werden, dass der Ionisationsgrad über eine sehr große Anzahl von Makroteilchen gemittelt wird. Dass die Ionisation gegenüber der Theorie ausschließlich überschätzt wird, ist sicher auf den Unterschied in der Berechnung der Ionisationswahrscheinlichkeiten zurückzuführen, wie es in Abschnitt 4.5.1 beschrieben wurde. Für jedes Makroteilchen steigt die die Wahrscheinlichkeit *linear* (siehe Glg. 4.12) mit der der Ionisationsrate und dem Zeitschritt. Die Ionisationswahrscheinlichkeit der Teilchengesamtheit nähert sich jedoch *exponentiell* an 1 an (Glg. 4.13), da nicht mehr Teilchen ionisiert werden können,

als in der *endlichen* Simulation vorliegen. Letzteres erklärt auch, wieso die Abweichung zu Beginn und gegen Ende der Simulation wieder gegen Null strebt und wieso dieses Verhalten allen Systemgrößen  $N_T$  gemeinsam ist. In Figur 5.1 wird nicht die relative Abweichung vom Erwartungswert dargestellt, sondern der absolute, vorzeichenbehaftete Wert. Diese Wahl ist sinnvoll, da sowohl der Ionisationsgrad  $D_H$  (5.1) als auch die Ionisationswahrscheinlichkeit  $P_{ADK}$  den Wertebereich von 0 bis 1 annehmen. Zu Beginn ist noch nahezu kein Teilchen ionisiert und zum Ende sind es fast alle. Das gilt natürlich sowohl für die Simulation, als auch die Erwartung.

Für mittelgroße Teilchenanzahlen  $\mathcal{O}(10^5)$  wurde beobachtet, dass der Kurvenverlauf nicht mehr so glatt ist, wie bei großen Teilchenanzahlen. Die maximale Abweichung sinkt jedoch entgegen der Erwartung unter den Wert großer Teilchenanzahlen.

Vermutlich ist diese Beobachtung nicht repräsentativ, da die zufällige Über- oder Unterschätzung des durch  $P_{ADK}$  erwarteten Ionisationsgrades bei geringeren Teilchenanzahlen einen größeren Einfluss hat.

Für kleine Teilchenzahlen  $N_H < 10^5$  wird sowohl eine Über- als auch Unterschätzung des Erwartungswertes beobachtet, wie an den Kurven für 1024 und 4096 Teilchen zu sehen ist. Des Weiteren fluktuiert die Abweichung stark und erreicht Maximalwerte von bis einschließlich 2%. Wenn alle auch hier nicht dargestellten Simulationen mit einbezogen werden, kann dennoch ein Vorzug zur Überschätzung der Ionisationsprozesse durch die Implementation festgestellt werden.

Die Tendenz zur Überschätzung des Ionisationsgrades gegenüber der Erwartung ist ebenfalls zurückzuführen auf die unterschiedlichen Berechnungsweisen der Wahrscheinlichkeiten. Es ist anzunehmen, dass die Abweichungen geringer und in beide Richtungen um den Erwartungswert lägen, wenn die Ionisationswahrscheinlichkeit für ein Makroteilchen durch 5.3 berechnet werden würde. Dass dennoch auch für die Berechnung nach Glg. (5.2) negative Abweichungen vom Erwartungswert beobachtbar sind, kann dadurch erklärt werden, dass für geringe Teilchenzahlen die durch zufällige Ionisation in jedem Zeitschritt erzeugte *Verteilung* um den Erwartungswert jetzt der dominierende Effekt ist. **Fazit**

Zuallererst ist sehr positiv zu bemerken, dass die Implementation des ADK-Modells mit der theoretischen Vorhersage sehr gut übereinstimmt. Es wurde die Erwartung bestätigt, dass die Abweichungen von der Vorhersage  $D_H - P_{ADK}$  mit kleinerer Teilchenanzahl wachsen. Durch Vergrößern der Teilchenzahl scheint sich die Abweichung jedoch nicht vollständig unterdrücken zu lassen und dies wird auf die Berechnung der Wahrscheinlichkeit zurückgeführt.

### 5.1.1 Konsequenz in Bezug auf die Wahrscheinlichkeitsberechnung

Prinzipiell muss die grundlegende Frage besser geklärt werden, wie die Ionisationswahrscheinlichkeit berechnet werden soll. Die ist Lösung mit einigem Aufwand verbunden, da die Einflüsse

aller möglichen Übergänge zwischen Energiezuständen mit einbezogen werden müssen. Es kann angenommen werden, dass das Problem für jedes der verschiedenen Bilder 3.2, in denen Feldionisation beschrieben werden kann, neu gelöst werden muss.

Konkret ist für die Implementation vorstellbar, dass wahlweise mehrere Methoden auswählbar gemacht werden, die Wahrscheinlichkeit zu berechnen. Außerdem könnte eine obere Schranke eingeführt werden, bei der für den Ionisationsprozess in der Simulation von Berechnung

$$P = \Gamma \cdot \Delta t_{\text{PIC}} \quad (5.2)$$

auf die Form

$$P = 1 - \exp(-\Gamma \cdot \Delta t_{\text{PIC}}) \quad (5.3)$$

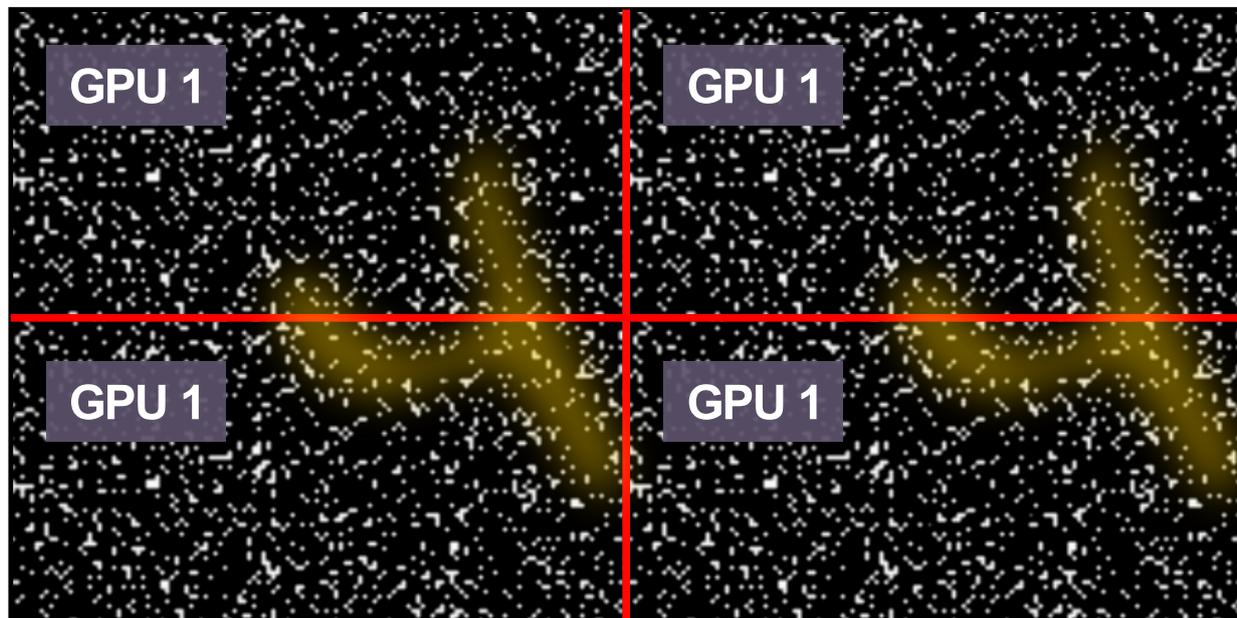
gewechselt wird. Diese gilt es aber noch zu bestimmen. Bei besonders großen Ionisationswahrscheinlichkeiten, die bei langen PIC-Zeitschritten oder großen äußeren elektrischen Feldern auftreten, steigt die Diskrepanz zwischen den Resultaten der beiden obigen Formeln. Einen Ausweg könnte da die Methode des *Subsamplings* (siehe Punkt 4.2.3) und die Implementation von *Mehrfachionisation* liefern.

## 5.2 Entdeckung von Artefakten durch fehlerhaftes Seeding

Wie in Punkt 4.3.1 angesprochen, ist die zuverlässige Erzeugung von Zufallszahlen auf GPU-Architekturen eine Herausforderung. Einerseits ist es schwierig trotz der Erzeugung von Millionen von Zufallszahlen pro GPU und Zeitschritt die Performanz des Algorithmus hoch zu halten und nicht um mehrere Größenordnungen zu verlangsamen. Andererseits ist es schwierig die Zufallszahlen trotz der hohen Erzeugungsrate auch *zufällig* zu halten. Mehr Zustände für den Zufallszahl-Generator sichern eine bessere Qualität, aber bedeuten gleichzeitig weniger Parallelität und daher eine geringere Performanz.

Um die Zufälligkeit des RNG zu testen, wurde bei den Simulationen aus dem vorigen Abschnitt 5.1 durch ein Plugin stets auch eine grafische Ausgabe in Form von PNG-Bildern erzeugt. PIconGPU verfügt damit über ein schnelles visuelles Analysewerkzeug zur ersten Begutachtung der Simulationsergebnisse noch während der Laufzeit. Das PNG-Plugin wurde genutzt, um die Ladungsdichte der Elektronen im 2D-Simulationsgebiet in Graustufen darzustellen. Zu Beginn der Simulation, wo alle Wasserstoff-Atome noch neutral sind, ist das Bild schwarz. Durch Ionisation werden Makro-Elektronen erzeugt und diese sind im Bild durch hellgraue Punkte sichtbar. Die Abbildung 5.2 zeigt die Ausgabe des PNG-Plugins einer PIconGPU-Simulation mit 256 x 128 Zellen, die auf 4 GPUs gerechnet wurde. Bei genauem Hinsehen sind sich wiederholende Strukturen erkennbar. Eine Auswahl dieser Strukturen wurde per

Hand in gelber Farbe hervorgehoben. Diese Muster weisen auf einen ungenügend gewählten Seed des Zufallszahl-Generators hin.



**Abbildung 5.2:** Elektronen-Ladungsdichte (qualitativ, in weiß) auf schwarzem Hintergrund. Es wurden GPU-Grenzen eingetragen und beispielhaft eine der periodischen Strukturen per Hand in gelber Farbe hervorgehoben.

Es wurden daraufhin die Seeds für den Zufallszahlgenerator untersucht. In Tabelle 5.1 wird eine Beispielfolge dieser Seeds für die 4 GPUs aus der Simulation in Abb. 5.2 betrachtet. Diese

Zeitschritt 1	Seeds
GPU 1	431631008
GPU 2	“” 010
GPU 3	“” 009
GPU 4	“” 011
Zeitschritt 2	Seeds
GPU 1	431631009
GPU 2	“” 008
GPU 3	“” 011
GPU 4	“” 010

**Tabelle 5.1:** Folge von Seeds für den Zufallszahl-Generator, die auf der CPU erzeugt und an die GPUs 1-4 weitergegeben wurden. Von besonderem Interesse sind hierbei nur die letzten 3 Stellen. Es fällt auf, dass sich im zweiten Zeitschritt die Seeds des ersten Zeitschritts in anderer Reihenfolge wiederholen. Dieses Verhalten ist unerwünscht, da es zur Erzeugung statistisch *abhängiger* Zufallszahlen führt.

Zahlen sind Startwerte zur Initialisierung des Zufallszahl-Generators auf der GPU. Sie werden

für gewöhnlich auf der CPU über *bitweise exklusive ODER*-Operationen (XOR) zwischen einer Anzahl Zahlen erzeugt, die der Anzahl an Kriterien entspricht, für die der Seed eineindeutig sein soll. Das bedeutet, wie in Punkt 4.3.1 aufgezählt, dass je ein logisches XOR mit dem *aktuellen Zeitschritt*, der *ID der GPU* usw. auf einen Anfangs-Seed ausgeführt wird.

Das Problem dabei ist, dass immer nur die letzten Bits des Seeds verändert werden. Es kam dazu, dass jede GPU innerhalb von  $N_{\text{GPUs}}$  Zeitschritten genau einmal denselben Seed zugewiesen bekam wie alle anderen GPUs. In jedem Zeitschritt waren diese zwar eineindeutig, aber über mehrere Zeitschritte hinweg wurde jede GPU mit den gleichen Seeds versorgt. So wurden von jeder GPU die gleichen Zufallszahlen gezogen.

Das Problem wurde früh erkannt und behoben<sup>1</sup>, sodass es keinen Einfluss mehr auf die Ergebnisse in dieser Arbeit hatte. Es kann aber dennoch als Beispiel für die Herausforderungen an eine GPU-Implementation gelten.

### 5.3 Signifikanztest auf Binomialverteilung

Im ersten Test 5.1 wurde bereits festgestellt, dass die Ionisationsprozesse in der Simulation um einen Erwartungswert  $P_{\text{ADK}}$  verteilt sind. In Abschnitt 4.5.2 wurde vermutet, dass es sich dabei um eine Binomialverteilung handelt. Für diesen Test wurde das Simulationsgebiet für die Analyse in kleinere Untergebiete unterteilt, die alle als statistisch unabhängig anzusehen sind, da es keinen Austausch zwischen Zellen gibt. Es wurden Signifikanztests für die Güte der Anpassung einer Binomialverteilung mit dem Erwartungswert  $p = P_{\text{ADK}}$  an die durch Zufallsexperimente erhaltene Verteilung über Ionisationserfolge  $k$  bei vier verschiedenen Wahrscheinlichkeiten  $P_{\text{ADK}}$  durchgeführt. Aufgrund der Ergebnisse aus 5.1 wurden zwei *Nullhypothesen* aufgestellt. Diese unterscheiden sich nur in der Berechnung des Erwartungswertes  $p$  durch die Gleichungen 5.2 und 5.3. Da es sich um diskrete Verteilungen handelt, wurde der *Pearson- $\chi^2$ -Test* gewählt [20].

$$\chi^2 = \sum_k \frac{(E_k - O_k)^2}{E_k} \quad (5.4)$$

Die  $k$  bezeichnen hierbei die Bins in den kumulierten Verteilungen über die “Ionisationserfolge” im Experiment mit  $n$  Wasserstoff-Atomen. In Gleichung (5.4) bezeichnet  $E_k$  den theoretisch erwarteten Wert im Bin und  $O_k$  den beobachteten Wert. Es folgen die Übersichten über die Summe der Abweichungen  $\chi^2$  der Häufigkeiten der simulierten Ionisationserfolge  $k$  von den erwarteten Werten der Binhöhen.

---

<sup>1</sup>Implementierung der Lösung durch A. Grund und R. Widera, private Kommunikation

$N_{\text{Teilchen}}$	$\chi^2$	$p$ -Wert
2	8.44e-05	1.00e+00
8	2.73e-04	1.00e+00
18	6.14e-04	1.00e+00
32	1.43e-03	1.00e+00
50	1.10e-04	1.00e+00
72	6.53e-05	1.00e+00
98	5.23e-05	1.00e+00
128	1.05e-03	1.00e+00
162	2.63e-05	1.00e+00
200	2.89e-03	1.00e+00
242	6.45e-03	1.00e+00
288	4.97e-03	1.00e+00
338	6.06e-03	1.00e+00
392	1.37e-02	1.00e+00
450	1.51e-02	1.00e+00
512	2.25e-02	1.00e+00
578	3.59e-02	1.00e+00
648	2.78e-02	1.00e+00
722	4.07e-02	1.00e+00
800	2.43e-02	1.00e+00

**Tabelle 5.2:** Nullhypothese zur Binomialverteilung mit Wk.  
 $P_{\text{ADK}} = 1 - \exp^{-\Gamma \Delta t} = 3,13E - 05$

$N_{\text{Teilchen}}$	$\chi^2$	$p$ -Wert
2	8.44e-05	1.00e+00
8	2.73e-04	1.00e+00
18	6.14e-04	1.00e+00
32	1.43e-03	1.00e+00
50	1.09e-04	1.00e+00
72	6.45e-05	1.00e+00
98	5.33e-05	1.00e+00
128	1.06e-03	1.00e+00
162	2.52e-05	1.00e+00
200	2.88e-03	1.00e+00
242	6.42e-03	1.00e+00
288	4.94e-03	1.00e+00
338	6.02e-03	1.00e+00
392	1.37e-02	1.00e+00
450	1.50e-02	1.00e+00
512	2.24e-02	1.00e+00
578	3.58e-02	1.00e+00
648	2.76e-02	1.00e+00
722	4.05e-02	1.00e+00
800	2.42e-02	1.00e+00

**Tabelle 5.3:** Nullhypothese zur Binomialverteilung mit Wk.  
 $P_{\text{ADK}} = \Gamma \cdot \Delta t = 3,13E - 05$

Die  $p$ -Werte in der jeweils rechten Spalte der Tabelle beschreiben die *Signifikanz*. Ein geringer  $p$ -Wert zeigt eine hohe Wahrscheinlichkeit an, dass die Nullhypothese abgelehnt werden kann. Ein hoher  $p$ -Wert dagegen beschreibt, dass nicht genug Evidenz besteht, um die Nullhypothese abzulehnen. Anders ausgedrückt beschreibt der  $p$ -Wert mit welcher Wahrscheinlichkeit extreme Abweichungen von der Verteilung erhalten werden können, unter der Voraussetzung, dass die Nullhypothese zutrifft.

$N_{\text{Teilchen}}$	$\chi^2$	$p$ -Wert
2	3.14e-07	1.00e+00
8	2.04e-03	1.00e+00
18	1.30e-03	1.00e+00
32	2.26e-02	1.00e+00
50	3.94e-02	1.00e+00
72	1.48e-01	1.00e+00
98	2.11e-01	1.00e+00
128	2.92e-01	1.00e+00
162	2.28e-01	1.00e+00
200	6.11e-01	1.00e+00
242	6.71e-01	1.00e+00
288	8.36e-01	1.00e+00
338	1.23e+00	1.00e+00
392	1.56e+00	1.00e+00
450	2.23e+00	1.00e+00
512	3.32e+00	1.00e+00
578	2.77e+00	1.00e+00
648	2.75e+00	1.00e+00
722	3.23e+00	1.00e+00
800	4.02e+00	1.00e+00

**Tabelle 5.4:** Nullhypothese zur Binomialverteilung mit Wk.  
 $P_{\text{ADK}} = 1 - \exp^{-\Gamma \Delta t} = 3,13E - 04$

$N_{\text{Teilchen}}$	$\chi^2$	$p$ -Wert
2	4.88e-07	1.00e+00
8	2.09e-03	1.00e+00
18	1.20e-03	1.00e+00
32	2.19e-02	1.00e+00
50	3.80e-02	1.00e+00
72	1.44e-01	1.00e+00
98	2.05e-01	1.00e+00
128	2.82e-01	1.00e+00
162	2.18e-01	1.00e+00
200	5.89e-01	1.00e+00
242	6.44e-01	1.00e+00
288	8.00e-01	1.00e+00
338	1.18e+00	1.00e+00
392	1.49e+00	1.00e+00
450	2.14e+00	1.00e+00
512	3.19e+00	1.00e+00
578	2.65e+00	1.00e+00
648	2.62e+00	1.00e+00
722	3.07e+00	1.00e+00
800	3.82e+00	1.00e+00

**Tabelle 5.5:** Nullhypothese zur Binomialverteilung mit Wk.  
 $P_{\text{ADK}} = \Gamma \cdot \Delta t = 3,13E - 04$

$$P_{\text{ADK}} = 3,12E - 03$$

$N_{\text{Teilchen}}$	$\chi^2$	$p$ -Wert
2	8.62e-03	9.96e-01
8	9.32e-02	1.00e+00
18	4.25e-01	1.00e+00
32	1.04e+00	1.00e+00
50	3.35e+00	1.00e+00
72	9.31e+00	1.00e+00
98	1.49e+01	1.00e+00
128	2.25e+01	1.00e+00
162	2.75e+01	1.00e+00
200	4.17e+01	1.00e+00
242	5.56e+01	1.00e+00
288	8.60e+01	1.00e+00
338	1.30e+02	1.00e+00
392	1.61e+02	1.00e+00
450	2.03e+02	1.00e+00
512	2.37e+02	1.00e+00
578	3.05e+02	1.00e+00
648	3.70e+02	1.00e+00
722	4.30e+02	1.00e+00
800	4.74e+02	1.00e+00

**Tabelle 5.6:** Nullhypothese zur Binomialverteilung mit Wk.  
 $P_{\text{ADK}} = 1 - \exp^{-\Gamma \Delta t} = 3,13E - 03$

$N_{\text{Teilchen}}$	$\chi^2$	$p$ -Wert
2	6.19e-03	9.97e-01
8	6.21e-02	1.00e+00
18	2.71e-01	1.00e+00
32	6.45e-01	1.00e+00
50	2.24e+00	1.00e+00
72	6.65e+00	1.00e+00
98	1.05e+01	1.00e+00
128	1.57e+01	1.00e+00
162	1.83e+01	1.00e+00
200	2.80e+01	1.00e+00
242	3.69e+01	1.00e+00
288	5.90e+01	1.00e+00
338	9.18e+01	1.00e+00
392	1.13e+02	1.00e+00
450	1.42e+02	1.00e+00
512	1.64e+02	1.00e+00
578	2.13e+02	1.00e+00
648	2.59e+02	1.00e+00
722	3.00e+02	1.00e+00
800	3.25e+02	1.00e+00

**Tabelle 5.7:** Nullhypothese zur Binomialverteilung mit Wk.  
 $P_{\text{ADK}} = \Gamma \cdot \Delta t = 3,13E - 03$

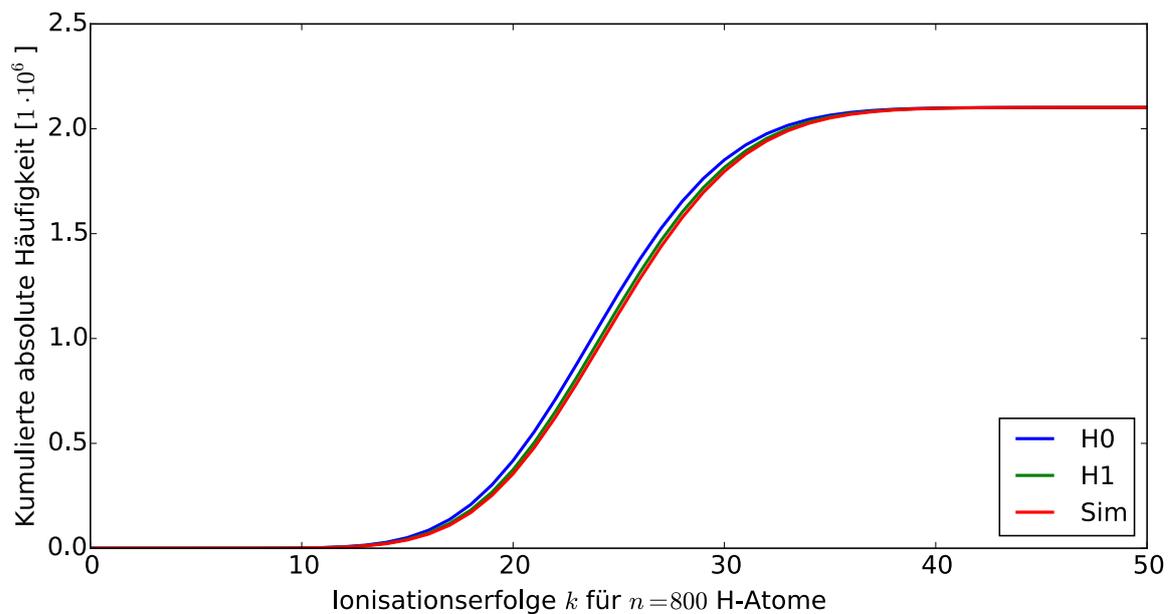
$N_{\text{Teilchen}}$	$\chi^2$	$p$ -Wert
2	4.28e+00	1.18e-01
8	5.74e+01	1.52e-09
18	3.13e+02	1.10e-55
32	7.23e+02	2.28e-131
50	1.52e+03	1.65e-285
72	2.66e+03	0.00e+00
98	4.28e+03	0.00e+00
128	6.38e+03	0.00e+00
162	9.25e+03	0.00e+00
200	1.31e+04	0.00e+00
242	1.79e+04	0.00e+00
288	2.36e+04	0.00e+00
338	3.02e+04	0.00e+00
392	3.77e+04	0.00e+00
450	4.66e+04	0.00e+00
512	5.67e+04	0.00e+00
578	6.79e+04	0.00e+00
648	8.04e+04	0.00e+00
722	9.45e+04	0.00e+00
800	1.09e+05	0.00e+00

**Tabelle 5.8:** Nullhypothese zur Binomialverteilung mit Wk.  
 $P_{\text{ADK}} = 1 - \exp^{-\Gamma \Delta t} = 3,08E - 02$

$N_{\text{Teilchen}}$	$\chi^2$	$p$ -Wert
2	4.38e-01	8.04e-01
8	5.59e+00	6.93e-01
18	4.09e+01	1.59e-03
32	8.74e+01	4.92e-07
50	1.73e+02	2.06e-15
72	2.89e+02	8.29e-28
98	4.52e+02	7.35e-47
128	6.60e+02	1.61e-72
162	9.51e+02	6.91e-112
200	1.41e+03	1.63e-180
242	1.96e+03	4.47e-267
288	2.63e+03	0.00e+00
338	3.39e+03	0.00e+00
392	4.24e+03	0.00e+00
450	5.26e+03	0.00e+00
512	6.40e+03	0.00e+00
578	7.60e+03	0.00e+00
648	8.95e+03	0.00e+00
722	1.05e+04	0.00e+00
800	1.19e+04	0.00e+00

**Tabelle 5.9:** Nullhypothese zur Binomialverteilung mit Wk.  
 $P_{\text{ADK}} = \Gamma \cdot \Delta t = 3,12E - 02$

Wie zu erwarten war, unterscheiden sich die Binomialverteilungen für die beiden Nullhypothesen nicht, wenn die Wahrscheinlichkeit zur Ionisation  $P_{\text{ADK}}$  kleiner ist, als  $1 \cdot 10^{-2}$ . Beide approximieren die simulierte Verteilung der Ionisationserfolge sehr gut. Nur in den Tabellen 5.8 sowie 5.9 müssen beide Nullhypothesen aufgrund des verschwindenden  $p$ -Wertes abgelehnt werden.



**Abbildung 5.3:** Kumulierte Häufigkeitsverteilungen der Nullhypothese H0 mit  $P_{\text{ADK}} = 1 - \exp^{-\Gamma\Delta t} = 3,08E-02$ , der Nullhypothese H1 mit  $P_{\text{ADK}} = \Gamma \cdot \Delta t = 3,12E-02$  und der simulierten Verteilung

In Abbildung 5.3 sind die kumulierten Häufigkeitsverteilungen noch einmal gegeneinander aufgetragen, für den Fall, dass  $n = 800$  und  $P_{\text{ADK}} \approx 3 \cdot 10^{-3}$ . Die beiden theoretisch berechneten Häufigkeitsverteilungen unterschätzen den Ionisationsgrad im Vergleich zur Simulation. Die Hypothese H1, die die Ionisationswahrscheinlichkeit nach Glg. 5.2 berechnet, approximiert die Simulation noch besser als H0.

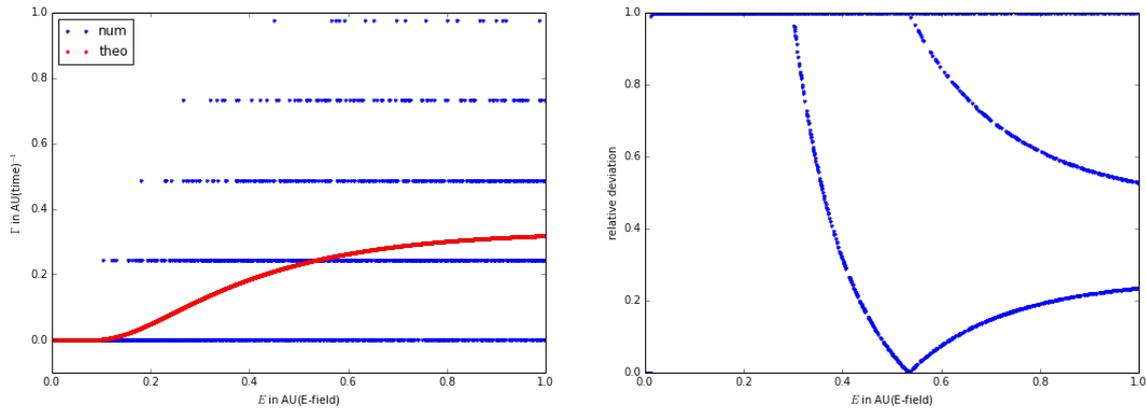
### 5.3.1 Interpretation des Signifikanztests

Die Überschätzung der Ionisation durch die Simulation wurde bereits in Abschnitt 5.1 als systematisches Verhalten festgestellt. Die Einträge der Nullhypothesen in jedem Bin weichen systematisch von denen der Simulation ab. Damit wird das  $\chi^2$  für hohe Ionisationswahrscheinlichkeiten so groß, dass die Nullhypothesen beide abgelehnt werden müssen. Ein optischer Vergleich zeigt jedoch, dass die grundlegende Annahme der Beschreibung der simulierten Verteilung der Ionisationserfolge durch eine Binomialverteilung sinnvoll ist. Besonders bei sehr kleinen und sehr großen Wahrscheinlichkeiten  $P_{\text{ADK}}$  wird diese Beschreibung sehr gut, da in dem ersten Fall kaum Atome ionisiert werden und es im letzteren Fall fast alle bereits sind.

## 5.4 E-Feld-Abhängigkeit der Ionisationsrate

Wie in Unterabschnitt 4.5.3 bereits ausführlicher erläutert, wurde in diesem Test die Abhängigkeit der ADK-Ionisationsrate vom elektrischen Feld an Wasserstoff-Atomen untersucht. Dabei änderte sich das elektrische Feld während der Simulation nicht, aber in einer Ortsdimension wies es einen konstanten Gradienten auf. Innerhalb einer Simulation wurde so der Bereich von  $E_{\min} = 5 \cdot 10^{-4}$  AU bis  $E_{\max} = 1$  AU abgetastet. Der zweite Parameter, welcher zwischen verschiedenen Simulationen variiert wurde, war der Zeitschritt  $\Delta t_{\text{PIC}}$ .

Die Ionisationsrate wurde zum einen mit der Formel aus dem ADK-Modell 3.15 analytisch bestimmt und andererseits aus der Anzahl an Ionisationsprozessen pro Zeitschritt berechnet (siehe 4.15). Das Ergebnis normiert auf je  $N_{\text{Teilchen}}$  Atome ergab je E-Feld-Wert einen Datenpunkt.

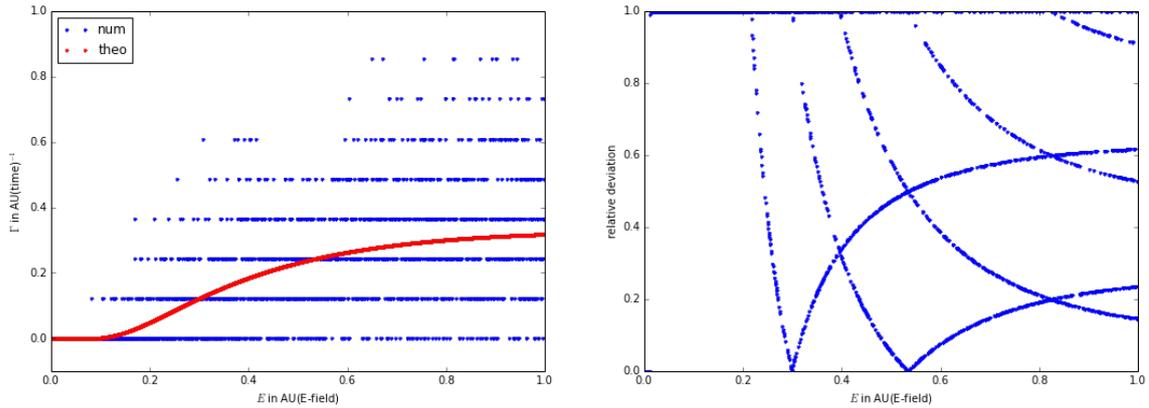


**Abbildung 5.4:**  $N_{\text{Schritte}} = 1$ ,  $N_{\text{Teilchen}} = 4096$  pro E-Feld-Wert,  $\Delta t_{\text{Sim}} = 1 \cdot 10^{-3}$  AU  
Vergleich von theoretisch errechneter (rot) und numerisch aus der Simulation bestimmter (blau) Ionisationsrate (links) sowie relative Abweichung (rechts).

Für einen sehr kleinen Zeitschritt nun, ist in Abb. 5.4 zu beobachten, dass die Abweichungen der numerischen von der theoretisch berechneten Ionisationsrate erheblich sind. Sie übersteigen teilweise mehrere 100% und weisen zudem regelmäßige Strukturen auf.

Die Diskretisierung der Ionisationsrate auf feste Werte entsteht dadurch, dass auch nur eine diskrete Anzahl von Teilchen simuliert wird. Die numerisch Ionisationsrate berechnet sich durch:

$$\Gamma_{\text{num}} = \frac{N_e}{N_{\text{H}} \cdot N_{\text{Schritte}} \Delta t_{\text{PIC}}} \quad (5.5)$$

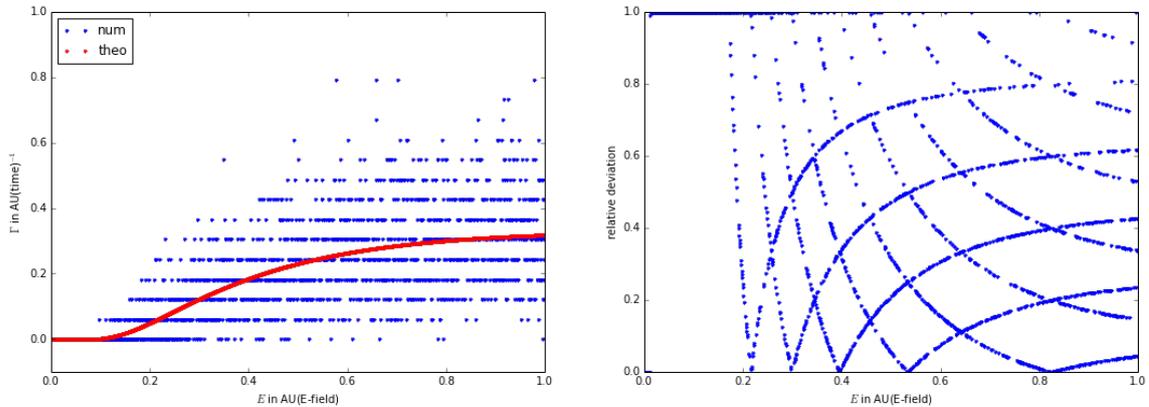


**Abbildung 5.5:**  $N_{\text{Schritte}} = 1$ ,  $N_{\text{Teilchen}} = 8192$  pro E-Feld-Wert,  $\Delta t_{\text{Sim}} = 1 \cdot 10^{-3}$  AU

Vergleich von theoretisch errechneter (rot) und numerisch aus der Simulation bestimmter (blau) Ionisationsrate (links) sowie relative Abweichung (rechts).

Diese Simulation wurde mit doppelt so vielen Teilchen pro E-Feld-Wert durchgeführt, wie die Simulation in Fig. 5.4.

In einer Simulation mit doppelter Teilchenanzahl verdoppelt sich auch die Zahl der angenommenen Werte für die Ionisationsrate. Der Wertebereich mit dem die numerische Ionisationsrate aufgelöst werden kann ist nun doppelt so fein. Dies ist in Abb. 5.5 zu beobachten.

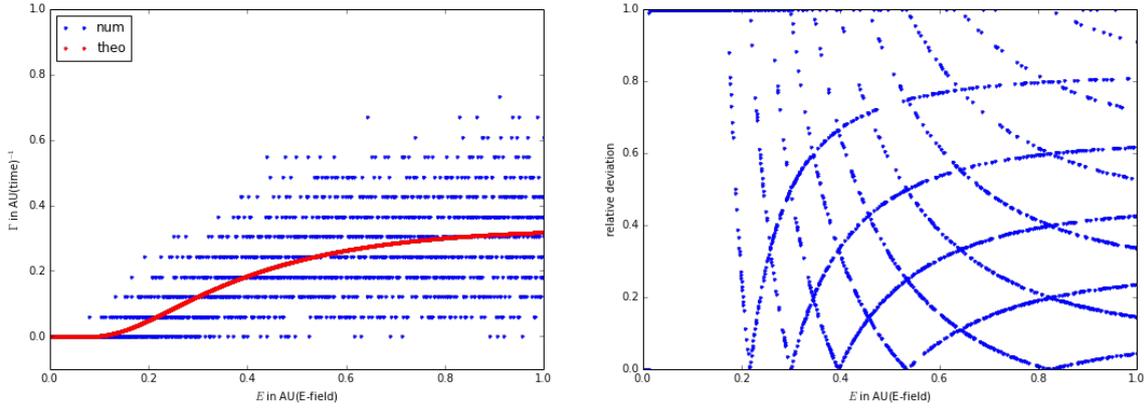


**Abbildung 5.6:**  $N_{\text{Schritte}} = 1$ ,  $N_{\text{Teilchen}} = 16384$  pro E-Feld-Wert,  $\Delta t_{\text{Sim}} = 1 \cdot 10^{-3}$  AU

Vergleich von theoretisch errechneter (rot) und numerisch aus der Simulation bestimmter (blau) Ionisationsrate (links) sowie relative Abweichung (rechts).

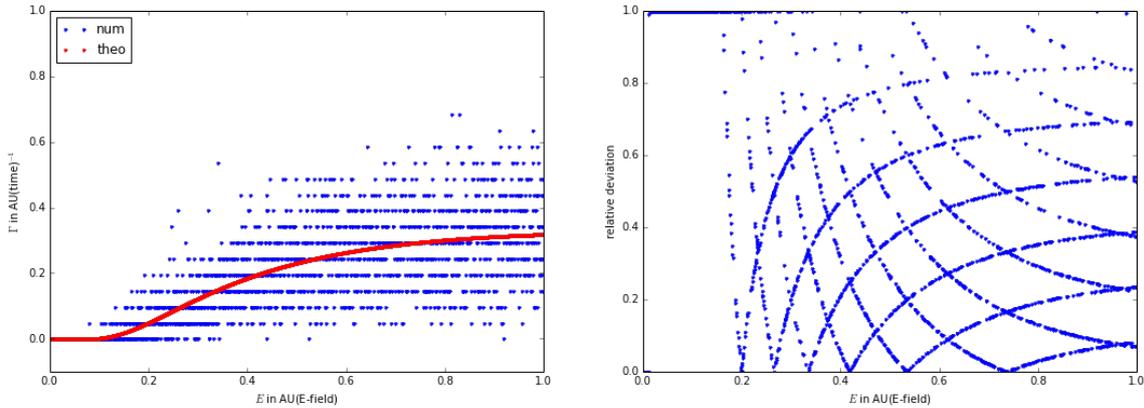
Bei dieser Simulation war die Anzahl der Teilchen viermal so hoch, wie bei Fig. 5.4.

Bei erneuter Verdopplung der Teilchenanzahl ist in Abb. 5.6 deutlich ersichtlich, dass eine erneute Verkleinerung der Breite der Verteilung der berechneten Ionisationsraten eintrat. Des Weiteren wird hier ersichtlich, dass die Verteilung offenbar der theoretischen Erwartung folgt.

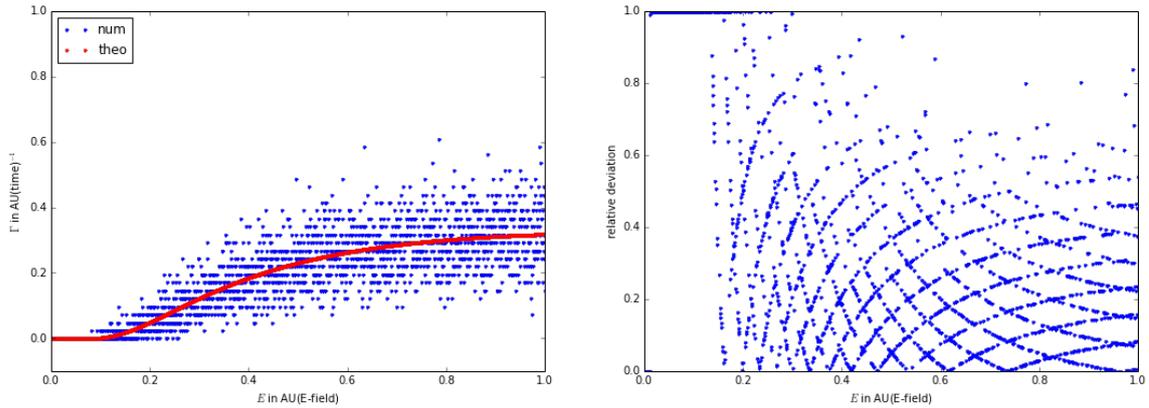


**Abbildung 5.7:**  $N_{\text{Schritte}} = 4$ ,  $N_{\text{Teilchen}} = 4096$  pro E-Feld-Wert,  $\Delta t_{\text{Sim}} = 1 \cdot 10^{-3}$  AU  
 Vergleich von theoretisch errechneter (rot) und numerisch aus der Simulation bestimmter (blau) Ionisationsrate (links) sowie relative Abweichung (rechts).  
 Hier wurde die Ionisationsrate über vier Zeitschritte berechnet, wobei die Teilchenanzahl allerdings wieder gleich der in Fig.5.4 war.

In Abb. 5.7 wurde getestet, wie die Verteilung der Ionisationsraten mit ursprünglicher Teilchenanzahl, aber nach 4 Zeitschritten aussieht. Sowohl die Verteilung als auch die Größenverhältnisse der Strukturen in der relativen Abweichung sehen denen aus Abb. 5.6 sehr ähnlich.



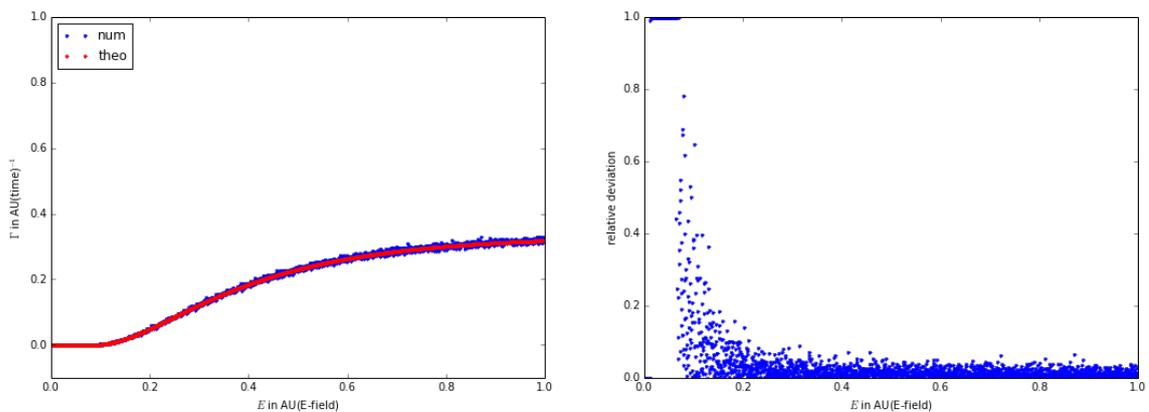
**Abbildung 5.8:**  $N_{\text{Schritte}} = 5$ ,  $N_{\text{Teilchen}} = 4096$  pro E-Feld-Wert,  $\Delta t_{\text{Sim}} = 1 \cdot 10^{-3}$  AU  
 Vergleich von theoretisch errechneter (rot) und numerisch aus der Simulation bestimmter (blau) Ionisationsrate (links) sowie relative Abweichung (rechts).  
 Hier wurde die Ionisationsrate über fünf Zeitschritte berechnet, mit ursprünglicher Teilchenanzahl, wie in Fig.5.4 war.



**Abbildung 5.9:**  $N_{\text{Schritte}} = 1$ ,  $N_{\text{Teilchen}} = 4096$  pro E-Feld-Wert,  $\Delta t_{\text{Sim}} = 5 \cdot 10^{-3}$  AU  
 Vergleich von theoretisch errechneter (rot) und numerisch aus der Simulation bestimmter (blau) Ionisationsrate (links) sowie relative Abweichung (rechts).  
 Hier wurde die Ionisationsrate über einen fünfmal so langen Zeitschritt wie in Fig.5.4 berechnet.

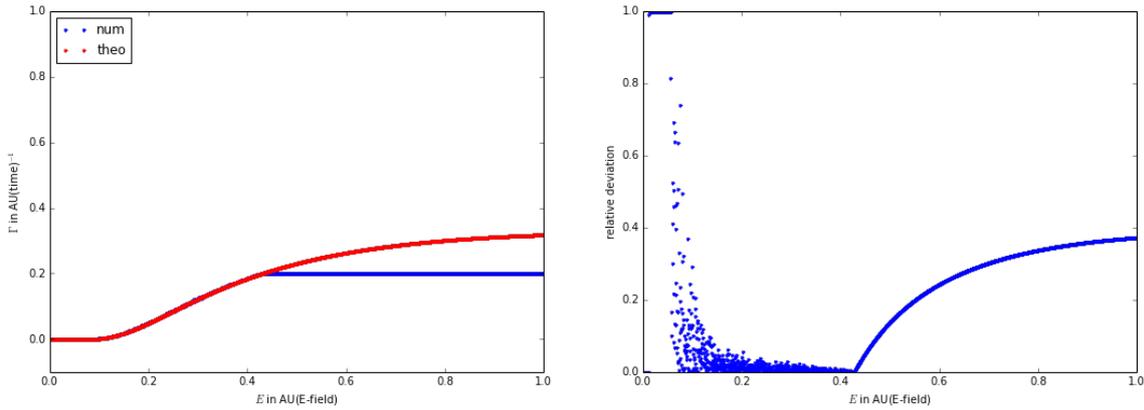
Abbildung 5.8 zeigt die numerisch bestimmten Ionisationsraten, die über 5 Zeitschritte gemittelt wurden. Zum Vergleich zeigt Abb. 5.9 die Ergebnisse nach nur einem Zeitschritt, der aber 5-mal so lang ist, wie zuvor. Hier wird deutlich, dass die Verteilung um den Erwartungswert  $\Gamma_{\text{ADK}}$  deutlich schmäler ist.

Daraus folgt die wichtige Erkenntnis, dass das Ionisationsmodell um einiges weniger genau repräsentiert wird, wenn die Zeitschritte zu klein werden. Die Zeitschritte hier liegen einige 100-mal unter der vermutlichen Größenordnung der Tunnelzeit. Diese Erkenntnis könnte Anlass zur Festlegung einer unteren Begrenzung des Zeitschritts in Abhängigkeit von der gewünschten Breite der Verteilung geben. Andererseits kann der Verbreiterung der Verteilung bei kurzen Zeitschritten mit einer Erhöhung der Teilchenanzahl entgegen gewirkt werden. Das erhöht jedoch den Rechenaufwand noch weiter.



**Abbildung 5.10:**  $N_{\text{Schritte}} = 1$ ,  $N_{\text{Teilchen}} = 4096$  pro E-Feld-Wert,  $\Delta t_{\text{Sim}} = 1$  AU  
 Vergleich von theoretisch errechneter (rot) und numerisch aus der Simulation bestimmter (blau) Ionisationsrate (links) sowie relative Abweichung (rechts).

Es werden nicht alle Ergebnisse für alle Zeitschritte gezeigt, da diese keine neuen Besonderheiten aufweisen. Mit wachsendem Zeitschritt schrumpft die Breite der Verteilung um den Erwartungswert zusammen. Es bleibt das gemeinsame Merkmal aller bisherigen Graphen, dass die *relative Abweichung* vom Erwartungswert, dargestellt in der Figur auf der jeweils rechten Seite, für kleine elektrische Felder besonders groß ist. Da sowohl kleine E-Felder, als auch kleine Zeitschritte für kleine Ionisationswahrscheinlichkeiten sorgen, spiegelt dieses Merkmal vorherige Tests wider.



**Abbildung 5.11:**  $N_{\text{Schritte}} = 1$ ,  $N_{\text{Teilchen}} = 4096$  pro E-Feld-Wert,  $\Delta t_{\text{Sim}} = 5 \text{ AU}$   
 Vergleich von theoretisch errechneter (rot) und numerisch aus der Simulation bestimmter (blau) Ionisationsrate (links) sowie relative Abweichung (rechts).

Die Abbildung 5.11 zeigt die Grenze dieses Tests, bedingt durch die Wahl der Simulationsparameter. Die Ionisationswahrscheinlichkeit ist bedingt durch den langen Zeitschritt nun so hoch, dass bereits alle  $N_{\text{Teilchen}}$  in einem Zeitschritt ionisiert werden. Damit wird die numerische bestimmte Ionisationsrate für höhere E-Felder konstant.

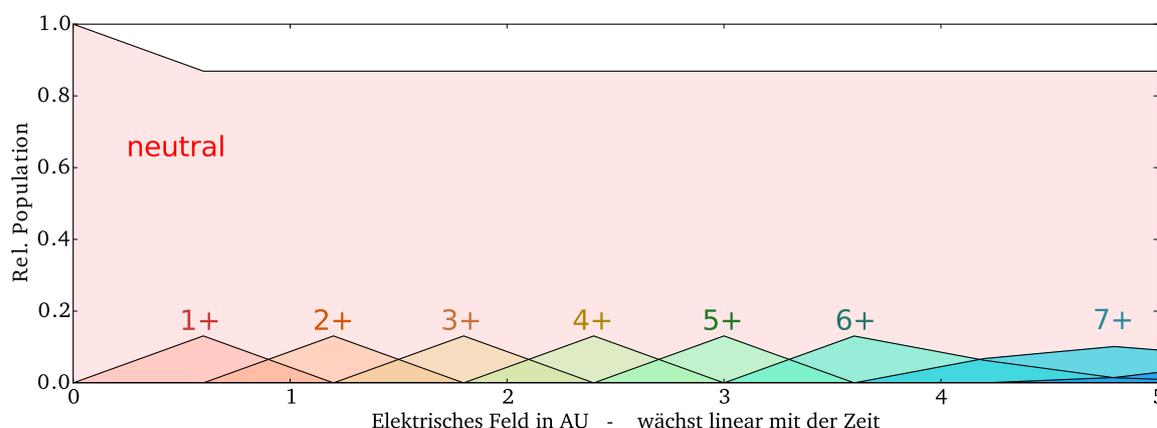
### Fazit

Der Test hat gezeigt, dass die Auflösung der Ionisationsrate für mehrere besonders kleine Zeitschritte im Vergleich zu 1 AU ungenauer wird, als wenn ein längerer Zeitschritt der gleichen Gesamtzeitdauer verwendet wird. Diese Erkenntnis weist auf eine untere Grenze für den Zeitschritt  $\Delta t_{\text{PIC}}$  hin, unterhalb derer die Modellierung der Feldionisation auf die beschriebene Weise nicht mehr sinnvoll ist.

## 5.5 Ladungszustandsverteilung bei linear wachsendem E-Feld

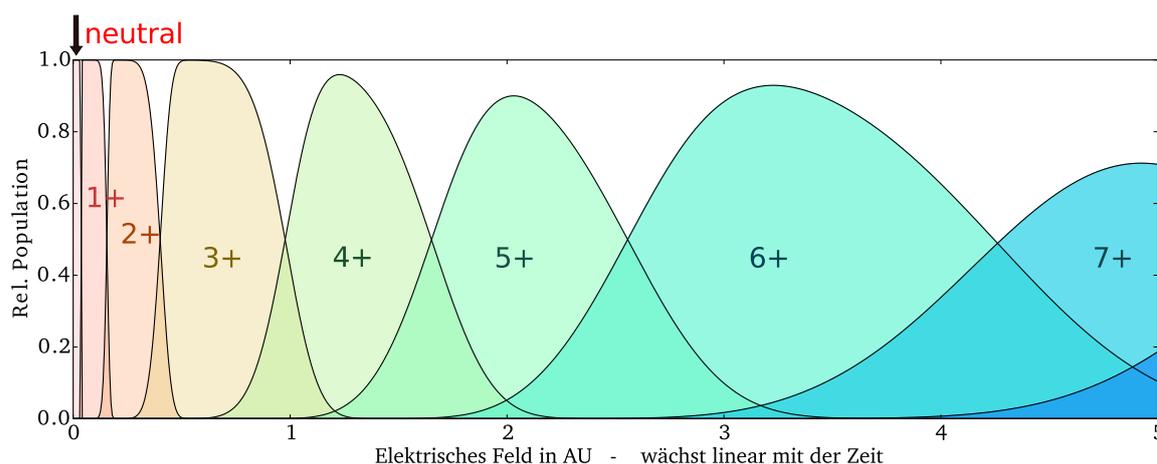
Nachdem die Implementation des ADK-Modells bei zeitlich konstanten E-Feldern getestet wurde, soll nun ein linear anwachsendes Feld betrachtet werden. In diesem Test wurden Neon-Atome auf einem Gitter platziert und das Ziel war es, die Effekte zu zeigen, die eine Abtastung

eines zeitlich variierenden Feldes in endlich vielen Schritten auf die Ladungszustandsverteilung haben kann.



**Abbildung 5.12:** Simulierte Ladungszustandsverteilung für Neon über 10 PIC- Zeitschritte  $\Delta t_{\text{PIC}} = 2,756 \cdot 10^{-1}$  AU. Dargestellt ist die Population der Ladungszustände über dem elektrischen Feld, welches linear mit der Zeit steigt. Der Gültigkeitsbereich des ADK- Modells wurde in Bezug auf die einzelnen Ladungszustände ungenügend abgetastet und führt zu einer unphysikalischen Ladungszustandsverteilung. Dadurch wird der Grundzustand trotz hoher Feldstärke nicht weiter ionisiert.

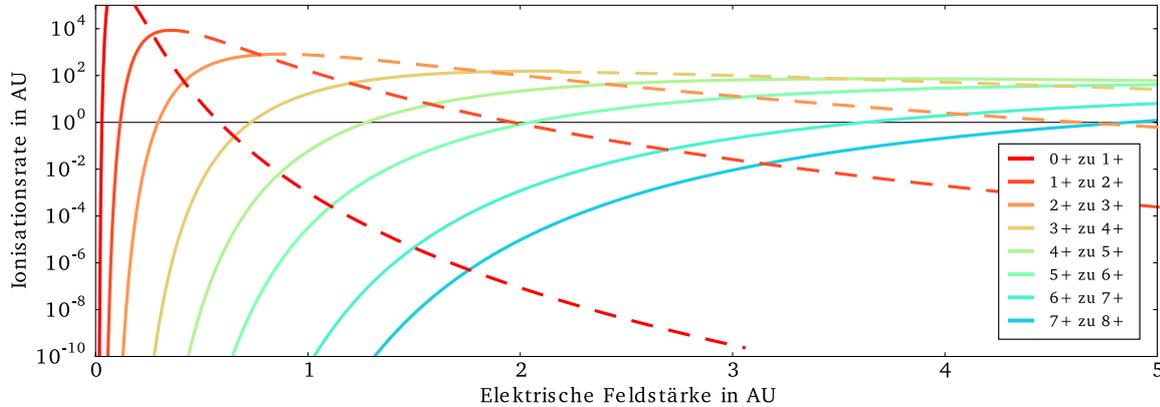
Die Abbildung 5.12 zeigt die relative Population der einzelnen Ladungszustände des Neons in Abhängigkeit des elektrischen Feldes in der Simulation. Auffällig ist, dass die Besetzung des Grundzustands trotz anwachsender Feldstärke in 10 Schritten nur auf etwa 85% fällt und von da an konstant bleibt. Alle Atome, die ionisiert wurden, werden auch weiter ionisiert und überschreiten den für das BSI-Modell erwarteten Wert von +6.



**Abbildung 5.13:** Theoretisch vorhergesagte Ladungszustandsverteilung von Neon in Abhängigkeit vom elektrischen Feld, welches linear in einer Zeit von 2,756 AU anwächst.

Die theoretisch erwartete Ladungszustandsverteilung ist in Figur 5.13 zu sehen. Sie wurde unter Verwendung des ADK-Modells und mittels des Konzepts der Markov-Kette 4.2.3 erzeugt. Vor allem der E-Feld-Bereich, in dem der Neon-Grundzustand vorliegt, ist sehr schmal. Ab etwa

0,04 AU ist der Grundzustand vollständig ionisiert und ab etwa 0,16 AU ist auch +1 vollständig zu +2 übergegangen.



**Abbildung 5.14:** Ionisationsrate  $\Gamma_{\text{ADK}}$  in Abhängigkeit von der elektrischen Feldstärke  $E$  für Neon im Test-Szenario 4.5.4. Zu beachten hier ist das unphysikalische Abfallen der Ionisationsrate (gestrichelte Linien) bei wachsender Feldstärke in den niedrigen Ladungszuständen.

Der Grund für die großen Abweichungen zwischen theoretischer Vorhersage und Simulation liegt im unphysikalischen Verhalten der ADK-Ionisationsrate, wenn Feldstärken erreicht werden, die die Potentialbarriere im Atom vollständig unterdrücken. Dann bricht das Tunnelmodell zusammen und zeigt bei wachsendem E-Feld fallende Ionisationsraten. Abbildung 5.14 kann entnommen werden, dass der Effekt für niedrige Ladungszustände besonders groß ist.

### 5.5.1 Fazit für Abtastung des E-Feldes

Während des Tests hat sich die Erwartung bestätigt, dass die theoretische Vorhersage der Ladungszustandsverteilung unter gewissen Bedingungen sehr schlecht bis gar nicht in der Simulation reproduziert wird. Das tritt auf, wenn ein wachsendes E-Feld, welches die Atome mehrfach ionisieren kann, nur ungenügend abgetastet wird. *Ungenügend* heißt in diesem Fall, dass die Anzahl der Abtastungen nur unwesentlich größer ist als die Anzahl der Ladungszustände, die das einzelne Ion dabei durchläuft.

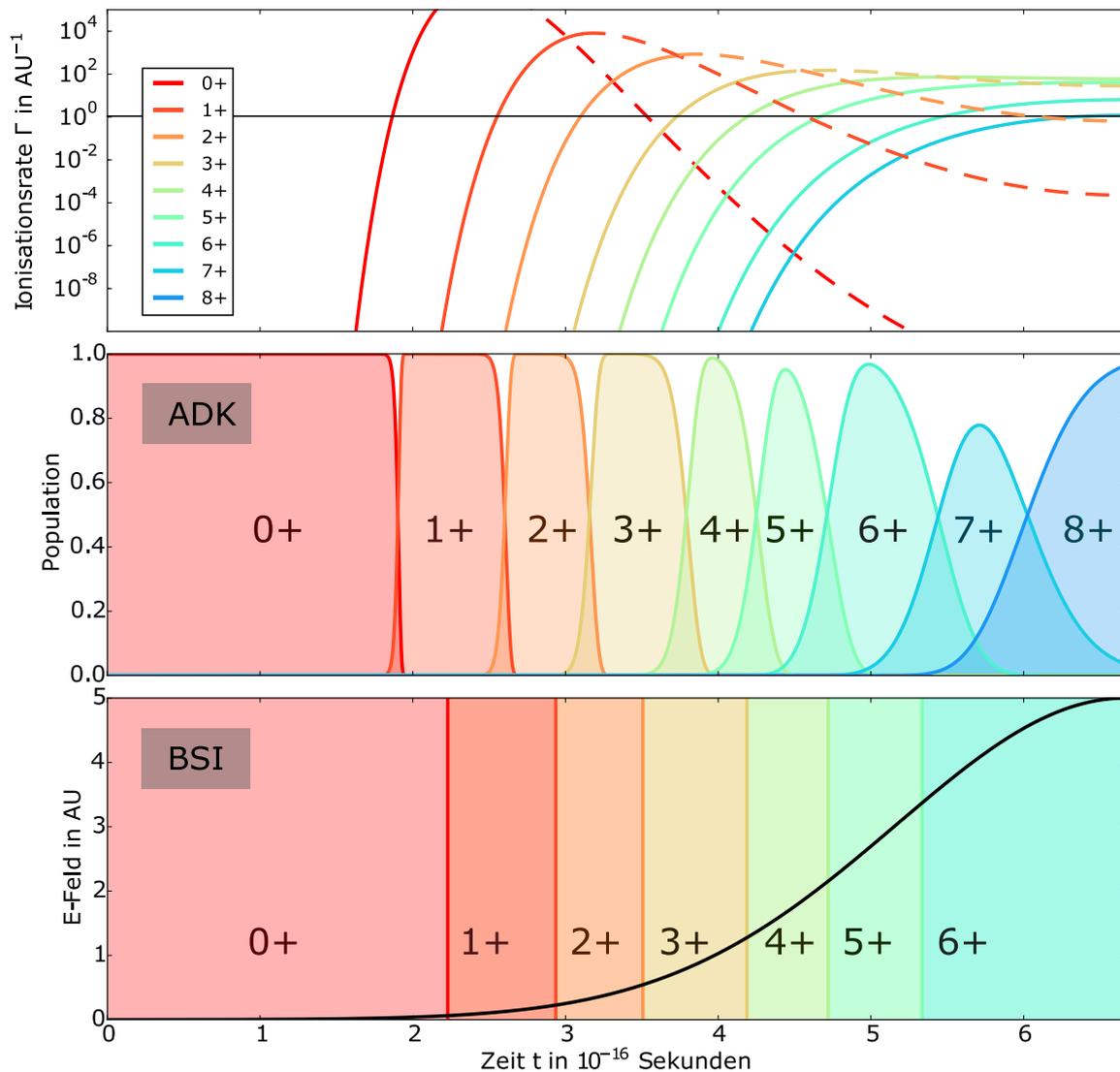
Es kann gefolgert werden, dass es nötig ist, den Bereich der Anwendbarkeit des Tunnelmodells für jeden einzelnen Ladungszustand mit mehreren Zwischenschritten abzutasten. Bei gegebenem Feldverlauf unterscheiden sich diese Bereiche allerdings stark. Kleinere Ladungszustände besitzen auch kleinere Ionisationsbereiche. Die Ionisationsbereiche größerer Ladungszustände näher dem Atomkern überschneiden sich dagegen aufgrund der weiter auseinander liegenden Ionisationsenergien.

Kleinere Zeitschritte zur besseren Abtastung sehr starker und schnell variierender Felder in einer Welle würden für den PIC-Algorithmus auch bedeuten, eine feinere Ortsauflösung wählen zu müssen. Das würde den Rechenaufwand der Simulationen enorm steigern. Ein Ausweg wäre, Tunnelionisationsmodelle mit dem BSI-Modell zu verbinden. Dadurch würde abgesichert,

dass zumindest ungefähr die korrekten Ladungszustände erreicht werden. Das würde aber allein nicht sicher stellen, dass die für Plasmadynamik entscheidende Elektronendichte in jedem Zeitschritt nah an der tatsächlichen liegt. Zusätzlich sollten lange Zeitschritte für den Ionisationsprozess im Algorithmus automatisch weiter unterteilt werden, um besser die tatsächlich erwartete Ladungszustandsverteilung abbilden zu können (Siehe *Subsampling* in Punkt 4.2.3).

## 5.6 Ladungszustandsverteilung bei exponentiell wachsendem E-Feld

Der vorige Test zielte darauf ab, die Schwächen des ADK-Modells selbst in der PIC-Implementation zu zeigen. Nun soll das Auftreten der Ladungszustände einzeln in Abhängigkeit der PIC-Schrittanzahl  $N_{\text{Schritte}}$  beobachtet werden. Dazu wurde die Gesamtzeit der Simulation erneut so gewählt, dass sie einer Viertel-Periode einer 800 nm-Welle entspricht. Doch wurde dieses Mal ein Feldverlauf gewählt, der gaußförmig von 0 AU bis auf 5 AU ansteigt. Nachfolgende Abbildung 5.15 zeigt die theoretische Erwartung für diesen Test. Alle drei Graphen teilen sich die Zeitachse und geben den Verlauf über die gesamte Simulation an. Die obere Figur zeigt die Ionisationsrate. Die mittlere Figur zeigt die erwartete Ladungszustandsverteilung in Abhängigkeit der Zeit. Die untere Figur stellt (in schwarz) den zeitlichen Verlauf des elektrischen Hintergrundfelds dar. Ebenso sind in dieser Figur die Bereiche für die Voraussage des Ladungszustands durch das BSI-Modell markiert.



**Abbildung 5.15:** Überblick über das erwartete Auftreten von Ladungszuständen bei Neon mit gaußförmig (zeitlich) wachsendem E-Feld.

Im oberen Bild zu sehen sind die ADK-Modell-Ionisationsraten in atomaren Einheiten. Dabei zu beachten: Unphysikalisches Absinken der Raten nach dem Überschreiten gewisser Feldstärken.

In der unteren Abbildung ist die zeitliche Entwicklung des elektrischen Feldes zu sehen sowie die jeweiligen Zeitpunkte, zu denen das Feld eine BSI-Schwelle überschreitet.

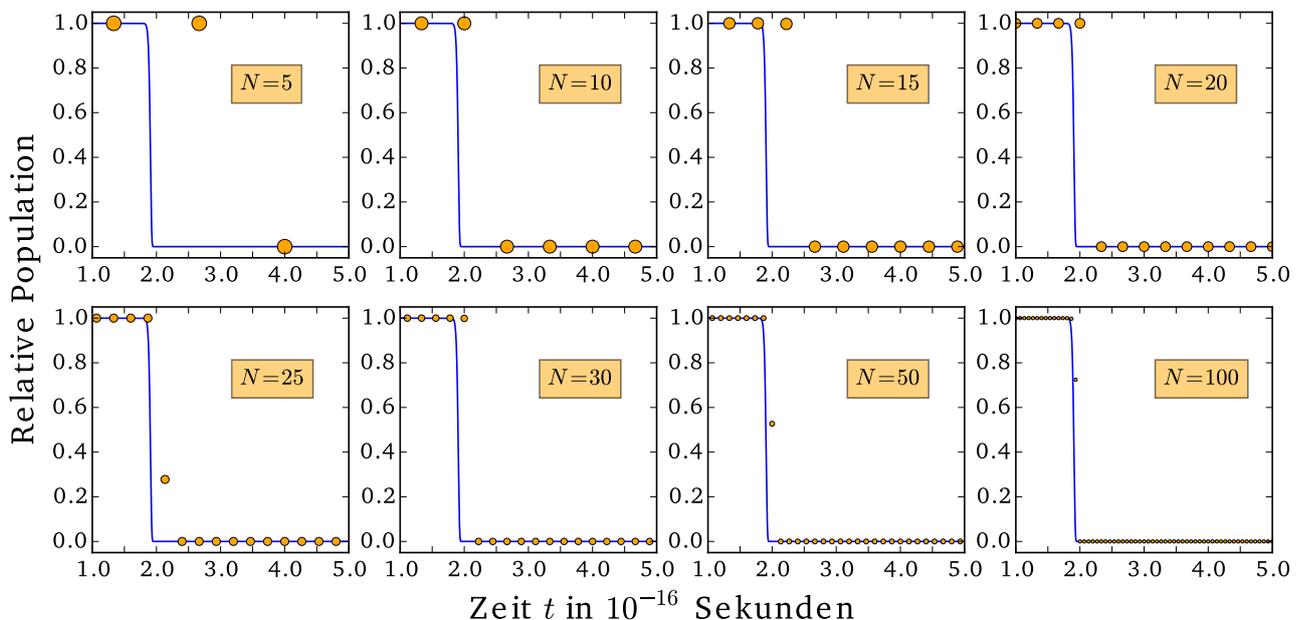
Die mittlere Abbildung zeigt die Abfolge der durch die Berechnung mit der Markov-Kette erwarteten Ladungszustände.

Es zeigt sich, dass das BSI-Modell, welches zur ersten Abschätzung und Auswahl der Simulationsparameter verwendet wurde, die auftretenden Ladungszustände für längere Zeiten unterschätzt. Allerdings ist dieses Verhalten zu erwarten, da sich mit dem Modell nur die Zustände vorhersagen lassen, die definitiv ionisiert werden sollten. Die Vorhersage durch die Markov-Ketten und das ADK-Modell zeigt, dass die Bereiche in denen mehrere Ladungszustände nebeneinander vorliegen für hohe Ionisationsstufen größer werden.

Letzteres kann durch das Verhalten der Ionisationsraten bei höheren Ionisationsstufen erklärt

werden. Wie in der oberen Figur von Abb. 5.15 zu sehen, steigen diese im Gegensatz zu den niedrigen Ionisationsstufen vergleichsweise flach an. Ursache dafür ist einerseits das zunächst exponentielle Ansteigen der elektrischen Feldstärke und das spätere Abflachen bei Erreichen des Maximums der Gaußkurve. Andererseits ist die Orbitalstruktur des Neons dafür verantwortlich. So können auch keine Ladungszustände der Stufe  $9+$  und  $10+$  erwartet werden, da die beiden  $1s$ -Schalen-Elektronen im Neon besonders stabil gebunden sind. Die notwendige Feldstärke zur Ionisation dieser Bindungszustände liegt um 1-2 Größenordnungen über  $E_{\max}$  dieses Tests.

Es wurden Simulationen mit PIConGPU durchgeführt, die den elektrischen Feldverlauf aus Abb. 5.15 in 5 bis 100 Schritten approximieren. Dabei wurde das zeitliche Auftreten jedes Ladungszustands einzeln mit der theoretischen Erwartung durch das ADK-Modell verglichen. Repräsentativ werden hier die Zustände  $\text{Ne}^0$ ,  $\text{Ne}^{1+}$  sowie  $\text{Ne}^{7+}$  und  $\text{Ne}^{8+}$  untersucht.



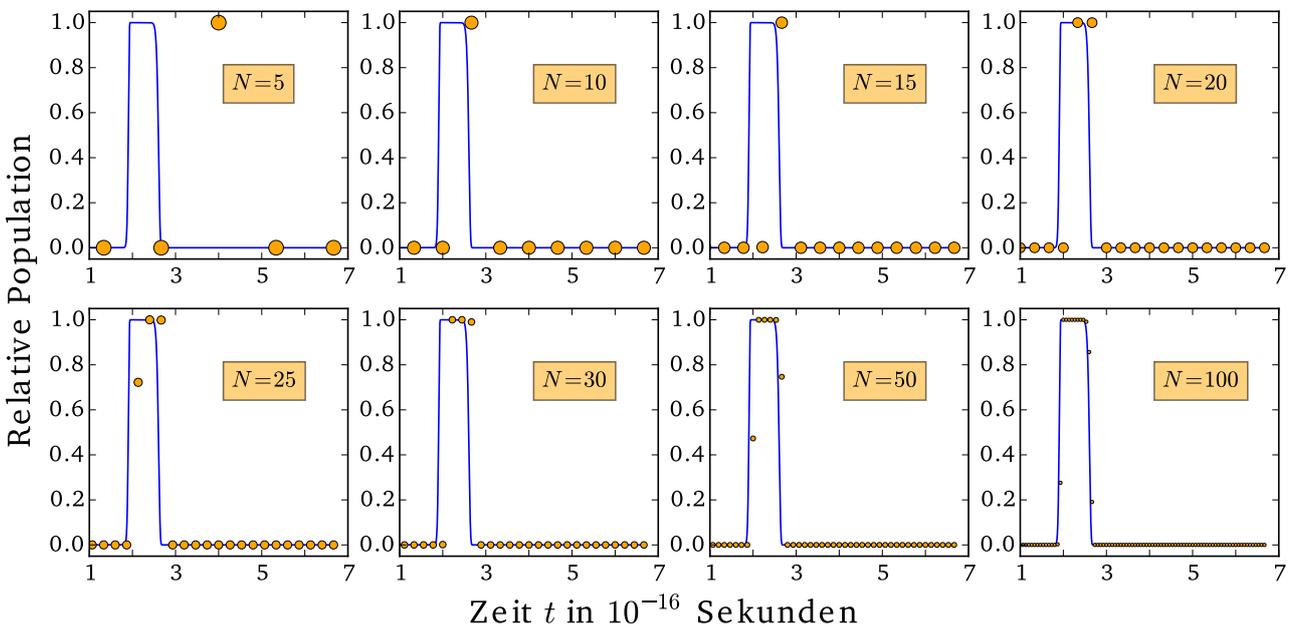
**Abbildung 5.16:** Zeitliche Entwicklung der Population des Neon-Grundzustands. Die blaue Kurve markiert die theoretische Erwartung. Jede Figur zeigt eine Simulation mit anderer Abtastung in  $N$  PIC-Schritten. Die orange-farbenen Punkte zeigen die simulierte relative Population.

Abbildung 5.16 zeigt die Entwicklung des Neon Grundzustandes. Es sind 8 einzelne Figuren zu sehen, die jede eine Simulation mit anderer Abtastungsrate zeigen. Die blauen Kurven markieren die durch Markov-Kette und ADK-Modell erzeugte theoretische Erwartung zur relativen Population des Ladungszustands. Die orange-farbenen Punkte sind die simulierten Daten. Der Übergang vom Grundzustand des Neon-Atoms in den Ladungszustand  $\text{Ne}^{1+}$  geschieht nahezu instantan. Durch die geringe Anzahl von Simulationsschritten  $N$  (obere Reihe der Abb.), wird der Ladungszustand deutlich zu spät ionisiert. Diese *systematische* Abweichung vom Zeitpunkt,

ab dem der Ladungszustand auftritt, beträgt mindestens

$$\Delta_{\text{sys}} t_{i \rightarrow i+1} \geq \Delta t_{\text{PIC}} \quad (5.6)$$

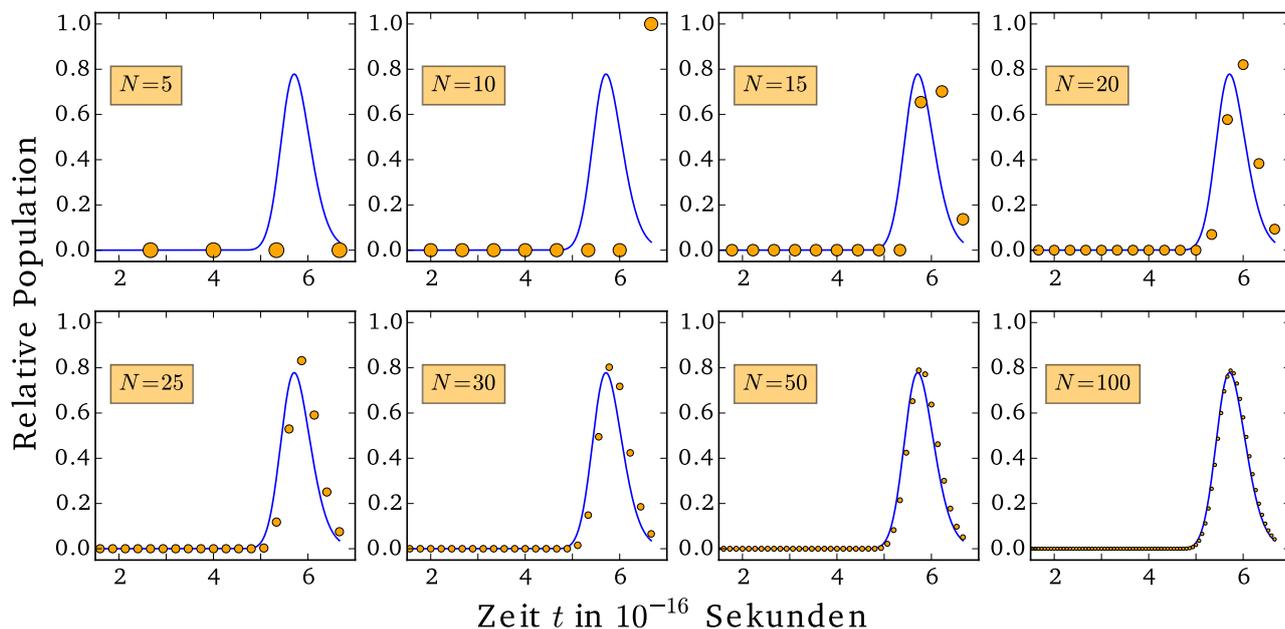
Die Beobachtung des Ladungszustands  $\text{Ne}^{1+}$  in Abbildung 5.17 zeigt ähnliche Ergebnisse. Der Ladungszustand tritt nahezu instantan auf und wird nahezu instantan wieder zu  $\text{Ne}^{2+}$  ionisiert. Die Gesamtheit der Neon-Atome befindet sich für eine Zeit, die deutlich kürzer als 1 AU ist in diesem Ladungszustand. Das ist eine Zeitskala, die sich deutlich unter der Zeit für Plasmaprozesse befindet. Die Resultate für die Ionisationsstufe +7 (Abb. 5.18) zeigen,



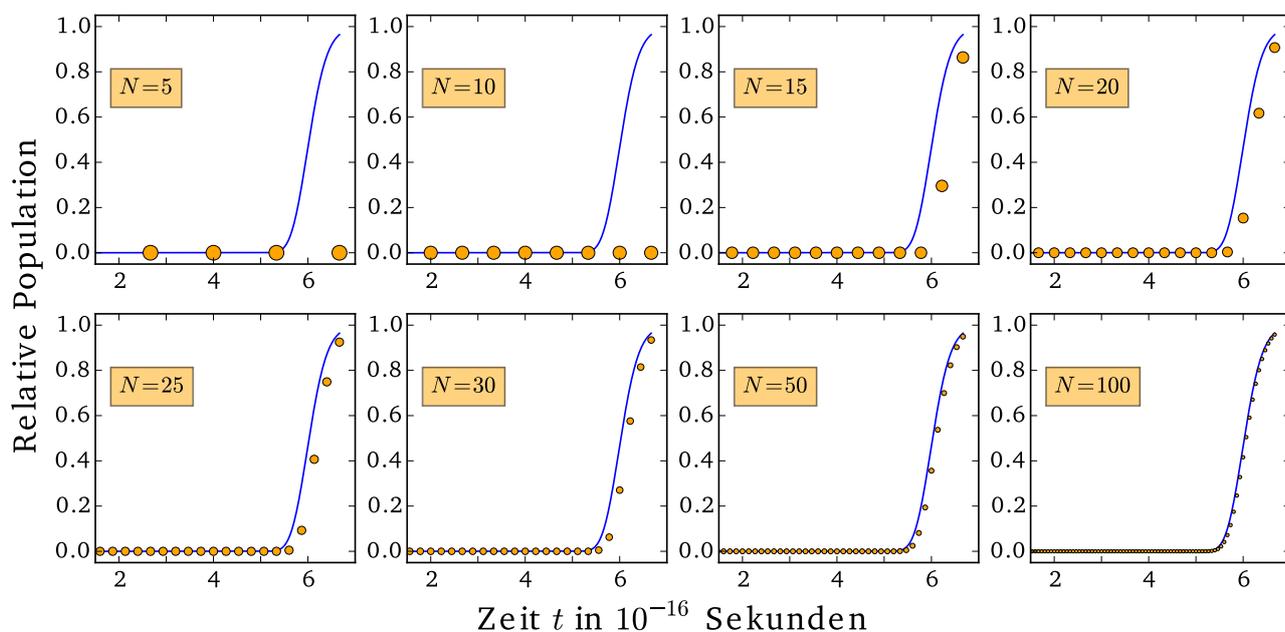
**Abbildung 5.17:** Zeitliche Entwicklung der Population Ladungszustands  $\text{Ne}^{1+}$ . Die blaue Kurve markiert die theoretische Erwartung, die orange-farbigen Punkte zeigen die simulierte relative Population. Auffällig ist die nahezu instantane Ionisation, erkennbar durch die steilen Übergänge der theoretischen Erwartung.

dass  $N = 15$  bzw.  $N = 20$  PIC-Schritte im vorliegenden Szenario ausreichend sind, um das Auftreten des Ladungszustands und die Entwicklung der Population abzubilden. Bei weniger Schritten tritt der Ladungszustand zu spät oder überhaupt nicht auf. Gleiches gilt auch für den Ladungszustand +8. In den Simulationen über nur 5 oder 10 Zeitschritte, kann diese Ionisationsstufe nicht erreicht werden.

Um trotz geringer Zeitaufösung die Dynamik der Ladungszustandsverteilung so gut wie möglich abbilden zu können, sollte das ADK-Modell mit dem BSI-Modell verbunden werden. Außerdem ist es nötig, dass mehr als eine Ionisationsstufe innerhalb eines Zeitschrittes überschritten werden können. Das in dieser Arbeit geschaffene Ionisations-Framework in PIConGPU erlaubt diese Möglichkeit bereits, allerdings wurden die Modelle noch nicht kombiniert, da sie zunächst für sich allein verifiziert werden sollten.



**Abbildung 5.18:** Zeitliche Entwicklung der Population Ladungszustands  $\text{Ne}^{7+}$ . Theoretische Erwartung - blau, simulierte Population - orange. Bei Abtastung des Feldverlaufs mit 5 Schritten tritt der Ladungszustand gar nicht auf. Eine gute Annäherung an die Erwartung wird ab  $N$ Schritte  $\geq 20$  erreicht.



**Abbildung 5.19:** Zeitliche Entwicklung der Population Ladungszustands  $\text{Ne}^{8+}$ . Theoretische Erwartung - blau, simulierte Population - orange. Bei Abtastung des Feldverlaufs sowohl mit 5 als auch mit 10 Schritten tritt der Ladungszustand nicht auf. Eine gute Annäherung an die Erwartung wird erst ab  $N$ Schritte  $\geq 20$  erreicht.

### **5.6.1 Notwendigkeit für Subsampling**

Die Simulationen in diesem Test haben gezeigt, dass bei ausreichend genauer Zeitauflösung die erwartete Ladungszustandsverteilung gut abgebildet werden kann. Allerdings sollten im Hinblick auf extremere Feldverläufe und Atome höherer Kernladungszahl Erweiterungen vorgenommen werden. Zeit- und Ortsauflösung in der Simulation bestimmen den Umfang der benötigten Hardware-Ressourcen und die Zeit bis zur Lösung des Problems. Daher sollte auch bei geringer Abtastgenauigkeit die Ladungszustandsverteilung nach jedem Zeitschritt nah an der Erwartung liegen. Subsampling und Mehrfachionisation sind die naheliegenden Mittel, um die geforderte Genauigkeit zu erreichen.

# 6 Zusammenfassung

Das Ziel dieser Arbeit war es, zu ermitteln, ob und wie gut Feldionisation in PIC Codes auf hochparallelen Architekturen zu modellieren ist. Es wurde das ADK-Tunnelionisationsmodell in PIconGPU implementiert und Tests unterzogen. Dadurch sollte das implementierte Modell verifiziert und validiert werden. Es wurde aufgezeigt, welche Herausforderungen es bei der Implementation von Feldionisation auf GPGPU-Architekturen auftraten. Sowohl die Erzeugung von neuen Elektronen zur Laufzeit als auch die Verwendung von Zufallszahlen auf der GPU wurden bewältigt. Im Vergleich mit der theoretischen Erwartung konnte das implementierte ADK-Modell verifiziert werden. Allerdings wurden auch Grenzen des Modells für stark variierende Felder auf Zeitskalen, die die Elektronendynamik mit Atom auflösen festgestellt. Mit der Methode des Substepsamplings der Simulationszeitschritte durch einen Markov-Ketten-Ansatz wurde ein Weg genannt, der den Anwendungsbereich des ADK-Modells erweitern kann. Eine Validierung des Modells kann erst im direkten Vergleich mit experimentellen Ergebnissen geschehen. Derzeitige experimentelle Methoden stehen jedoch erst am Anfang des Vordringens in Bereiche von Attosekunden-Zeitskalen, die für die Ionisationsdynamik von Relevanz sind.

## 6.1 Anwendungsfälle der bestehenden Implementation

Zur Zeit des Abschlusses dieser Arbeit verfügt PIconGPU offiziell bereits über die besprochenen Stärken des Spezies-Konzepts sowie das Barrier-Suppression-Ionisationsmodell und das ADK-Ionisationsmodell. Mit diesen Werkzeugen können alle physikalischen Szenarien bearbeitet werden, die von weniger extremer Natur sind, als das Beispiel in Abschnitt 3.4. Bei Lasern relativistischer Intensität und damit auch einer nicht vernachlässigbaren Magnetfeldkomponente brechen die bisher entwickelten Tunnelionisationsmodelle zusammen, da ihre Grundannahmen verletzt werden. Das bedeutet konkret, dass die Wechselwirkung von Ti:Sa-Lasern mit Gas-Targets beschrieben werden kann, wenn die Intensität des Lasers unterhalb von  $10^{18} \text{ W/cm}^2$  liegt. Die meisten Tunnelionisations-Experimente der Vergangenheit sind damit modellierbar.



# 7 Ausblick

Die durchgeführten Tests in dieser Arbeit konnten einige Grenzen in der Anwendbarkeit der Implementation von Feldionisation aufzeigen. Dabei wurden bereits mögliche Lösungsstrategien angesprochen, welche in diesem Kapitel nochmals zusammengetragen und als Ausblick für zukünftige Arbeit geordnet dargestellt werden.

## 7.1 Offene Fragen und Lösungsansätze

Im Laufe der Arbeit traten einige Fragen auf, die nicht abschließend geklärt werden konnten oder Gegenstand aktueller Forschung sind:

- Existiert eine reale Tunnelzeit? Falls ja, wie groß ist sie?
- Wie berechnet sich die tatsächliche Tunnelwahrscheinlichkeit für ein Elektron aus dem Atom unter Einbeziehung aller möglichen Übergänge?
- Wie kann die Wahrscheinlichkeit für das reale Elektron am besten über einen endlichen Zeitschritt für ein Makroelektron approximiert werden?
- Wie können die bekannten Ionisationsmodelle auf beliebige Atomsorten erweitert werden?
- Wie kann Feldionisation im Regime der Unterdrückung der Potentialbarriere modelliert werden, um mit den experimentellen Laser- Parametern Schritt zu halten?

### 7.1.1 Vorschläge zur Verbesserung der Modellierung von Feldionisation

Im Laufe der Arbeit wurde mehrfach angesprochen, dass lange Zeitschritte im PIC-Algorithmus für den Ionisationsprozess unterteilt werden sollten. Dabei könnten innerhalb des Codes mithilfe der Methode der Markov-Ketten und einem approximierten Feldverlauf Übergangswahrscheinlichkeiten in verschiedene Ladungszustände berechnet werden. Damit würde Mehrfachionisation ermöglicht. Um die Modellierung von Feldionisation zu verbessern, sollten auch weitere physikalische Effekte berücksichtigt werden. Zu diesen gehören der Stark-Effekt, welcher die Ionisationspotentiale unter Einwirkung starker elektrischer Felder verändert. Weiterhin wird

in Zukunft bei immer höheren Laser-Intensitäten auch das Magnetfeld eine Rolle spielen. Der Einfluss von Kopplungseffekten zwischen äußerem Magnetfeld und Elektronenspin sollte untersucht werden. Als Voraussetzung muss dafür die atomare Struktur der Atome detaillierter implementiert werden. Im Verlauf der Arbeit wurden im Ansatz bereits die Quantenzahlen  $n$ ,  $l$ , und  $m$  implementiert, um auf weitere Ionisationsmodelle, wie das Keldysh-Modell vorzubereiten. Außerdem wurde das Bauer-Mulser-Modell für BSI implementiert, blieb aber noch ungetestet.

Es sollte die Freiheit des geschaffenen Frameworks genutzt werden, um weitere Ionisationsmodelle zu implementieren. Diese Modelle können verifiziert gegeneinander getestet werden. Das BSI-Modell kann zum Beispiel modifiziert werden, indem der Abschirmungseffekt der Inner-Schalen-Elektronen berücksichtigt wird. Konkret würde sich die BSI-Feldstärke dann wie folgt berechnen.

$$F_{\text{BSI}} = \frac{\mathcal{E}^2}{4Z} \quad \Rightarrow F_{\text{BSI}} = \frac{\mathcal{E}^2}{4Z_{\text{eff}}} \quad (7.1)$$

Zur Reduzierung des Aufwands bei der Modellierung atomarer Strukturen können Konzepte verwendet werden, die die verschiedenen Konfigurationen in wenige Gruppen zusammen fassen [30]. Es ist sehr wahrscheinlich, dass eine hochpräzise Simulation der Realität nicht durch Ratenmodelle zu erreichen ist. Die Anbindung der Simulation an große Datenbanken zur Laufzeit ist daher ein Projekt, was parallel zu dem dieser Arbeit bereits bearbeitet wird. Damit könnten exakte Ionisationswahrscheinlichkeiten, Wirkungsquerschnitte und Ladungszustandsverteilungen abgefragt und verwendet werden. Jedoch bleiben die Ratenmodelle eine Methode, die in kurzer Zeit gute Abschätzungen und Voraussagen der realen Dynamik liefern kann. Daher könnte ein Ansatz sein, mehrere Modelle innerhalb ihrer Gültigkeit miteinander zu kombinieren. So könnte beispielsweise mit dem BSI-Modell kompensiert werden, dass das ADK-Modell für hohe Feldstärken unphysikalische Ergebnisse liefert.

Bislang werden die Elektronen noch ohne Anfangsimpuls nach der Ionisation initialisiert. Auch dafür sollten Modelle implementiert werden, um die Plasmadynamik besser zu modellieren.

### 7.1.2 Weitere Tests zur Verifikation

Auf dem Weg zur vollständigen Plasmasimulation wäre es sinnvoll, zu klären, wie groß beispielsweise auch die örtlichen Abweichungen einer Elektronendichte-Verteilung im Vergleich zu realer Erwartung wären. Dabei müssten der Einfluss der Formfaktoren der Makroteilchen getestet werden. Das heißt, der Einfluss, ob eine Menge realer Teilchen punktförmig oder als Polygon  $n$ -ter Ordnung dargestellt wird. Damit könnte es möglich werden, Grenzen für den Fehler einer simulierten Elektronendichte in Bezug auf die vermutlich reale Dichte angeben zu können.

### 7.1.3 Möglichkeiten der Validierung

Wenn die Verifikation der Ionisationsmodelle abgeschlossen ist, kann PIConGPU verwendet werden, um Experimente zu Ionisations und Starkfeld-Effekten nachzustellen. Mithilfe der Originalresultate aus den Experimenten kann dann eine Validierung des Codes stattfinden. Frühere Experimente lieferten jedoch keine ausreichenden Erkenntnisse über den Ionisationsprozess auf Attosekunden-Zeitskalen. Ein neuartiger Versuchsaufbau des Instituts für Optik und Quantenelektronik der Universität Jena scheint dahingehend vielversprechend [35]. Dabei werden Impuls-Spektren von Neon-Ionen mit einer *Attoclock*-Technik aufgenommen. Eine variabel einstellbare Elliptizität des Strahls liefert Informationen über die Zeit der Ionisation und die Strahlintensität zu dieser Zeit. Bei der Analyse der Ionenspektren wird die Impulsverteilung entfaltet und liefert Informationen zur Ionisationsdynamik.

## 7.2 Relevante Anwendungsfälle

Es existieren durchaus Prozesse, die bisher experimentell schwierig zu kontrollieren sind. Eine gute Modellierung von Feldionisation ist Voraussetzung, um mithilfe von Simulationen in kurzer Zeit die wichtigen Parameterbereiche abzutasten. Damit kann PIConGPU ein wichtiges Werkzeug werden, um neue Physik zu entdecken und bei der Kontrolle von Experimenten zu helfen. Solche Experimente sind

- Kiefeld-Beschleuniger (LWFA - *laser wakefield acceleration*)
- *Trojan-Horse*-Prozesse [10]
- Zwei-Farben-Laser-Elektron-Beschleunigung [36]



## 8 Literaturverzeichnis

- [1] M. V. Ammosov, N. B. Delone, and V. P. Krainov. Tunnel ionization of complex atoms and of atomic ions in an alternating electromagnetic field. *Soviet Physics - JETP*, 64(6):1191–1194, 1986.
- [2] D. Bauer. Ejection energy of photoelectrons in strong-field ionization. *Phys. Rev. A*, 55:2180–2185, Mar 1997.
- [3] D. Bauer and P. Mulser. Exact field ionization rates in the barrier-suppression regime from numerical time-dependent Schrödinger-equation calculations. *Physical Review A*, 59(1):569+, January 1999.
- [4] M. Chen, E. Cormier-Michel, C. G. R. Geddes, D. L. Bruhwiler, L. L. Yu, E. Esarey, C. B. Schroeder, and W. P. Leemans. Numerical modeling of laser tunneling ionization in explicit particle-in-cell codes. *Journal of Computational Physics*, 236:220–228, March 2013.
- [5] N. B. Delone and Vladimir P. Krainov. Tunneling and barrier-suppression ionization of atoms and ions in a laser radiation field. *Physics-Uspokhi*, 41(5):469–485, May 1998.
- [6] N. B. Delone and Vladimir P. Krainov. AC Stark shift of atomic energy levels. *Physics-Uspokhi*, 42(7):669, 1999.
- [7] Carlchristian Eckert, Axel Huebl, Benjamin Worpitz, and René Widera. mallocmc 2.2.0crp: Stabilizing the release, September 2015. This library started as a fork of ScatterAlloc, see citations <http://dx.doi.org/10.1109/InPar.2012.6339604>.
- [8] M. Garten. Comparing field ionization models in simulations of laser-matter interaction. Master’s thesis, TU Dresden, 2013.
- [9] Hermann Haken and Hans Christoph Wolf. *Atom- und Quantenphysik / Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen ; mit 29 Tabellen, 167 Aufgaben und vollständigen Lösungen*. Springer, Berlin ; Heidelberg [u.a.], 6., verb. und erw. Aufl. edition, 1996.

- 
- [10] B. Hidding, G. Pretzler, J. B. Rosenzweig, T. Königstein, D. Schiller, and D. L. Bruhwiler. Ultracold electron bunch generation via plasma photocathode emission and acceleration in a beam-driven plasma blowout. *Phys. Rev. Lett.*, 108:035001, Jan 2012.
- [11] R.W. Hockney and J.W. Eastwood. *Computer Simulation Using Particles*. CRC Press, 1988.
- [12] A M Ishkhanyan and V P Krainov. Non-exponential tunneling ionization of atoms by an intense laser field. *Laser Physics Letters*, 12(4):046002, 2015.
- [13] L. V. Keldysh. Ionization in the field of a strong electromagnetic wave. *Soviet Physics JETP*, 20:1307–1314, May 1965.
- [14] J. Kelling, G. Ódor, M.F. Nagy, H. Schulz, and K.-H. Heinig. Comparison of different parallel implementations of the 2+1-dimensional kpz model and the 3-dimensional kmc model. *The European Physical Journal Special Topics*, 210(1):175–187, 2012.
- [15] V. P. Krainov. Ionization rates and energy and angular distributions at the barrier-suppression ionization of complex atoms and atomic ions. *J. Opt. Soc. Am. B*, 14(2):425–431, Feb 1997.
- [16] L.D. Landau and E.M. Lifshitz. *Course of Theoretical Physics Vol 3 Quantum Mechanics*. Pergamon Press, 1958.
- [17] Alexandra S. Landsman, Matthias Weger, Jochen Maurer, Robert Boge, André Ludwig, Sebastian Heuser, Claudio Cirelli, Lukas Gallmann, and Ursula Keller. Ultrafast resolution of tunneling delay time. *Optica*, 1(5):343–349, Nov 2014.
- [18] Peter Mulser and Dieter Bauer. *High power laser-matter interaction*. Springer tracts in modern physics. Springer, Berlin, 2010.
- [19] NIST. Atomic spectra database ionization energies. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/ionEnergy.html>.
- [20] K. A. Olive et al. Review of Particle Physics. *Chin. Phys.*, C38:090001, 2014.
- [21] Naomi Oreskes, Kristin Shrader-Frechette, and Kenneth Belitz. Verification, validation, and confirmation of numerical models in the earth sciences. *Science*, 263(5147):641–646, 1994.
- [22] A. M. Perelomov and Vladimir S. Popov. Ionization of atoms in an alternating electric field. III. *Soviet Physics JETP*, 25:336–343, 1966.

- 
- [23] Vladimir S. Popov. Tunnel and multiphoton ionization of atoms and ions in a strong laser field (Keldysh theory). *Physics-Uspekhi*, 47(9):855–885, October 2007.
- [24] S.V. Popruzhenko, V.D. Mur, and V.S. Popov. Coulomb correction to the ionization rate of atoms in high-frequency intense laser fields. *Physics Letters A*, 372(31):5167 – 5170, 2008.
- [25] H. R. Reiss. Theoretical Methods in Quantum Optics: S-Matrix and Keldysh Techniques for Strong-Field Processes. *Progress in Quantum Electronics*, 16:1–71, 1992.
- [26] H. R. Reiss. Unsuitability of the keldysh parameter for laser fields. *Phys. Rev. A*, 82:023418, Aug 2010.
- [27] H R Reiss. The tunnelling model of laser-induced ionization and its failure at low frequencies. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 47(20):204006, 2014.
- [28] V M Ristić, J M Stevanović, and M M Radulović. Transition rate dependence on the improved turning point in adk-theory. *Laser Physics Letters*, 3(6):298, 2006.
- [29] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics (Revised Edition)*. Addison Wesley, 1 edition, September 1993.
- [30] Takeshi Sato and Kenichi L. Ishikawa. Time-dependent complete-active-space self-consistent-field method for multielectron dynamics in intense laser fields. *Phys. Rev. A*, 88:023402, Aug 2013.
- [31] Y. Sentoku and A. Kemp. Numerical methods for particle simulations at extreme densities and temperatures: Weighted particles, relativistic collisions and reduced currents. *Journal of Computational Physics*, 227(14):6846–6861, July 2008.
- [32] Yulian V. Vanne and Alejandro Saenz. Solution of the time-dependent dirac equation for multiphoton ionization of highly charged hydrogenlike ions. *Phys. Rev. A*, 85:033411, Mar 2012.
- [33] M. Vranic, T. Grismayer, J. L. Martins, R. A. Fonseca, and L. O. Silva. Particle merging algorithm for pic codes. 2015.
- [34] R. Wiehle. *Experimental examination of ionization processes of noble gases in strong laser fields*. PhD thesis, Albert-Ludwigs-University Freiburg, 2005.
- [35] P. Wustelt, M. Möller, T. Rathje, A. M. Sayler, T. Stöhlker, and G. G. Paulus. Momentum-resolved study of the saturation intensity in multiple ionization. *Phys. Rev. A*, 91:031401, Mar 2015.

- [36] L.-L. Yu, E. Esarey, C. B. Schroeder, J.-L. Vay, C. Benedetti, C. G. R. Geddes, M. Chen, and W. P. Leemans. Two-color laser-ionization injection. *Phys. Rev. Lett.*, 112:125001, Mar 2014.
- [37] Gennady L. Yudin and Misha Yu. Ivanov. Nonadiabatic tunnel ionization: Looking inside a laser cycle. *Phys. Rev. A*, 64:013409, Jun 2001.

## **Erklärung**

Hiermit erkläre ich, dass ich diese Arbeit im Rahmen der Betreuung am Institut für Kern- und Teilchenphysik ohne unzulässige Hilfe Dritter verfasst und alle Quellen als solche gekennzeichnet habe.

Marco Garten  
Dresden, 12.11.2015