

Fotoionización de moléculas diatómicas asistida por láser: de atto- a femto-pulsos

Laser-assisted photoionization of diatomic molecules: from atto- to femto-pulses

Diego I.R. Boll^{1,*} y Omar A. Fojón^{1,2}

¹Instituto de Física Rosario, CONICET-UNR.

Bv. 27 de Febrero 210 bis - (2000) Rosario - Argentina

²Escuela de Ciencias Exactas y Naturales, FCEIA, UNR.

Pellegrini 250 - (2000) Rosario - Argentina

Recibido 11/11/2014; Aceptado 16/6/2015

Estudiamos teóricamente la fotoionización de moléculas diatómicas sencillas mediante pulsos XUV de corta duración, asistida por láser en el infrarrojo cercano. Además de los conocidos efectos de interferencia por emisión coherente desde ambos centros moleculares, analizamos las interferencias que surgen por presencia del campo láser asistente. Asimismo, examinamos la transición desde esquemas tipo streaking (donde la duración de los pulsos XUV es de algunos cientos de attosegundos) hacia esquemas tipo Free electron laser (en los que la duración de los mismos abarca uno o varias veces el período del campo láser asistente).

Palabras Clave: Attopulsos, Fotoionización, Laser asistente, Moléculas.

We study theoretically the laser-assisted photoionization of simple diatomic molecules by short XUV pulses. In addition to the well known interference effects produced by the coherent emission from both molecular centers, we analyze the interferences induced by the presence of the assistant laser field. Moreover, we examine the transition from a streaking-like configuration (where the XUV pulses have durations of hundreds of attoseconds) to the Free electron laser configuration (in which the XUV pulse duration comprises one or many laser periods).

Keywords: Attopulses, Photoionization, Assistant laser, Molecules.

I. INTRODUCCIÓN

El desarrollo de pulsos en el extremo ultravioleta (XUV) con duraciones de algunos cientos de attosegundos, e incluso femtosegundos, atrajo una atención creciente a la física atómica y molecular en los últimos años. Estos pulsos permiten estudiar la dinámica de fotoionización con una resolución temporal cercana a los tiempos característicos del electrón. Cuando la reacción es asistida mediante un campo láser en el infrarrojo cercano, como en los experimentos tipo pump-probe, entonces es posible extraer información sobre los atto-pulsos^(1,2), así como monitorear y/o controlar la dinámica electrónica en átomos y moléculas^(3,4) o mapear paquetes de onda moleculares⁽⁵⁾.

El ingrediente fundamental en todos estos trabajos son los diferentes tipos de interferencias que pueden presentarse, particularmente aquellas que generan dis-

tribuciones asimétricas de fragmentos de la reacción. Cuando se consideran junto con las interferencias tipo Young (ver⁽⁶⁾ y referencias allí incluidas) y las interferencias tipo confinamiento^(7,8), se espera que emerja un conjunto más amplio de fenómenos.

Incluso cuando es posible^(9,10), la resolución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (TDSE) representa un desafío computacional y generalmente los resultados no poseen una interpretación directa. En este contexto, el uso de modelos simplificados en acuerdo cualitativo con resultados ab-initio puede ser muy valioso en la comprensión de los fenómenos físicos subyacentes.

En este trabajo, analizamos la fotoionización monocromática de moléculas diatómicas sencillas mediante un modelo aproximado, donde los estados moleculares iniciales se describen como una combinación lineal de orbitales de Slater (STOs) centrados en cada uno de los átomos que componen la molécula. Los esta-

* e-mail: boll@ifir-conicet.gov.ar

dos finales se describen mediante el ansatz Coulomb-Continuum⁽¹¹⁾, donde se tiene en cuenta la interacción Coulombiana entre el electrón eyectado y el blanco residual.

Por último, empleamos el modelo Separable Coulomb-Volkov (SCV)^(12,13) para estudiar la reacción de fotoionización asistida mediante campo láser en el infrarrojo cercano (NIR), donde el proceso de fotoionización se lleva adelante mediante pulsos XUV con duraciones que van desde cientos de attosegundos (streaking) hasta algunos femtosegundos (FELs).

Se utilizan unidades atómicas a menos que se indique lo contrario.

II. MÉTODOS

Consideremos la fotoionización de moléculas diatómicas por un tren de pulsos, asistida por un láser monocromático en el infrarrojo cercano. En particular consideraremos el ion molecular monoelectrónico H_2^+ ya que su descripción teórica es más simple que para blancos multielectrónicos. A continuación describimos los elementos principales del modelo SCV^(12,13).

El sistema de coordenadas considerado es aquel donde \mathbf{R} representa el vector de separación internuclear apuntando desde el núcleo 1 al 2 y \mathbf{r}_i denota el vector posición del electrón respecto del núcleo i -ésimo. El vector posición del electrón respecto del centro de masa molecular vendrá dado por $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$.

La amplitud de transición en la aproximación dipolar, correspondiente a la reacción de fotoionización mediante un tren de pulsos XUV, en presencia de un campo láser asistente y en el gauge velocidad está dado por⁽¹⁴⁾,

$$M_{scv}(\mathbf{p}) = -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \Psi_f(\mathbf{r}, t) | \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(t) | \Psi_i(\mathbf{r}, t) \rangle, \quad (1)$$

donde $\hat{\mathbf{p}}$ es el operador momento, $\Psi_i(\mathbf{r}, t)$ y $\Psi_f(\mathbf{r}, t)$ son las funciones de onda correspondientes a los canales iniciales y finales de la reacción, respectivamente. El potencial vector $\mathbf{A}(t)$ representa el tren de pulsos XUV y está dado por

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{\Pi}(\phi) A_0 \sum_k \varsigma_k e^{-i\Omega t} \exp\left[-\frac{(t-t_k)^2}{2\tau^2}\right], \quad (2)$$

$$= \mathbf{\Pi}(\phi) A_0 \tau \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} R(\omega) e^{-i(\omega+\Omega)t} d\omega, \quad (3)$$

donde Ω es la frecuencia central del pulso. $\mathbf{\Pi}(\phi)$ y A_0 representan el vector de polarización y la amplitud de cada pulso en el tren, respectivamente. La duración de los pulsos τ está relacionada con el ancho total a altura media (FWHM) a través de la relación $\tau_{FWHM} = 2\sqrt{\ln 2} \tau$. El factor de interferencia representado por $R(\omega)$ en Ec. (3) viene dado por,

$$R(\omega) = \sum_k \varsigma_k \exp[i\omega t_k - \omega^2 \tau^2 / 2]. \quad (4)$$

donde t_k es el tiempo de arribo (delay) del pulso k -ésimo del tren y ς_k es un factor que asume los valores ± 1 de acuerdo al tipo de tren que se desee simular. Para intensidades bajas e intermedias del NIR ($I_L < 10^{13} \text{W/cm}^2$), en sistemas con un potencial de ionización alto, el parámetro de Keldysh asume valores mayores que 1 ($\gamma \sim 9$ en nuestro caso) indicando que el NIR puede ionizar el blanco solo a través de mecanismos multifotónicos, cuya contribución comparada con la ionización mediante el XUV es despreciable. Además para las intensidades NIR consideradas, se espera que la polarización de los estados ligados sea pequeña⁽¹⁵⁾. Por lo tanto, consideramos para los estados iniciales funciones de onda *laser-free* dadas por,

$$\Psi_i(\mathbf{r}, t) = \psi_i^0(\mathbf{r}) \exp(iI_p t), \quad (5)$$

donde I_p es el potencial de ionización del estado molecular inicial dado por ψ_i^0 .

Este último se representa mediante desarrollos de dos centros en términos de STOs en cada centro molecular (indicados como 1 y 2)

$$\psi_i^0(\mathbf{r}) = \sum_j c_j^{(1)} \phi_j(\mathbf{r}_1) + \sum_k c_k^{(2)} \phi_k(\mathbf{r}_2), \quad (6)$$

donde $\phi_i(\mathbf{r})$ son los STOs.

Los estados finales asintóticos del electrón se describen mediante funciones de onda del tipo Coulomb-Volkov⁽¹²⁾, en donde se tiene en cuenta tanto la interacción coulombiana del electrón eyectado con el blanco residual como la influencia del campo láser asistente,

$$\Psi_f(\mathbf{r}, t) = \psi_f^0(\mathbf{r}) \exp\left\{-\frac{i}{2} \int^t [\mathbf{p} + \mathbf{A}_L(t')]^2 dt'\right\}, \quad (7)$$

donde \mathbf{p} es el valor asintótico del momento del fotoelectrón y $\mathbf{A}_L(t)$ es el potencial vector del campo láser asistente. La función de onda $\psi_f^0(\mathbf{r})$ describe el estado del continuo de la molécula⁽¹¹⁾, que viene dado de forma aproximada por:

$$\psi_f^0(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} N_p^2 G(\mathbf{r}_1) G(\mathbf{r}_2), \quad (8)$$

donde $N_p = \Gamma(1 + i\nu) \exp(\pi\nu/2)$ y $G(\mathbf{r}_i) = {}_1F_1(-i\nu_i; 1; -i(pr_i + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}_i))$ es la función hipergeométrica confluyente. El parámetro de Sommerfeld viene dado por $\nu_i = Z_i/p$, donde Z_i es la carga residual efectiva del i -ésimo centro molecular.

El factor que multiplica a la función de onda $\psi_f^0(\mathbf{r})$ en la Ec. (7) es la conocida fase Volkov que describe un electrón de momento \mathbf{p} en presencia de un campo electromagnético representado mediante su potencial vector \mathbf{A}_L . Este potencial vector, correspondiente al campo láser asistente, esta dado por,

$$\mathbf{A}_L(t) \cong -\frac{\mathbf{E}_1}{\omega_0} \sin(\omega_0 t), \quad (9)$$

siendo ω_0 la frecuencia y \mathbf{E}_1 la amplitud del correspondiente campo eléctrico.

Reemplazando las Ecs. (3), (5), (7) y (9) en la Ec. (1), y teniendo en cuenta que en el gauge velocidad las integrales espaciales y temporales son separables, la amplitud de transición podrá ser reescrita como,

$$M_{scv}(\mathbf{p}) = A_0 \tau \sqrt{2\pi} M_{ph}(\mathbf{p}) \sum_{m_1, n_1 = -\infty}^{\infty} i^{n_1} (-1)^{m_1} \times R(\omega) J_{m_1}(M_1) J_{n_1}(N_1), \quad (10)$$

donde se han definido,

$$M_1 = E_1^2 / (2\omega_0)^3, \quad (11)$$

$$N_1 = \mathbf{p} \cdot \mathbf{E}_1 / \omega_0^2, \quad (12)$$

$$\omega = p^2/2 + I_p - \Omega + (2M_1 + 2m_1 + n_1) \omega_0. \quad (13)$$

La amplitud de transición monocromática $M_{ph}(\mathbf{p})$, asociada al proceso de fotoionización por absorción de un fotón XUV, está dada por,

$$M_{ph}(\mathbf{p}) = -i \langle \psi_f^0(\mathbf{r}) | \mathbf{\Pi}(\phi) \cdot \nabla | \psi_i^0(\mathbf{r}) \rangle. \quad (14)$$

Para obtener $M_{ph}(\mathbf{p})$, empleamos el modelo Coulomb Continuum (CC)^(11,12) en donde se realiza una aproximación de *peaking*⁽¹³⁾. Esta aproximación, válida cuando $pR \gg 1$, permite escribir

$$M_{ph}(\mathbf{p}) = \chi_1 M_{at}^{(1)} + \chi_2 M_{at}^{(2)}, \quad (15)$$

donde los factores de interferencia molecular $\chi_{1,2}$ están dados por

$$\chi_{1,2} = N_p^* e^{\pm i\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}/2} G^*(\mp \mathbf{R}), \quad (16)$$

y los factores $M_{at}^{(1,2)}$ corresponden a las amplitudes de transición atómica desde cada uno de los centros moleculares. Finalmente, el espectro de los fotoelectrones podrá ser escrito como,

$$\frac{d^3 P_{scv}}{dp d\Omega_e} = p^2 |M_{scv}(\mathbf{p})|^2. \quad (17)$$

donde $d\Omega_e = \sin \theta_e d\theta_e d\phi_e$ representa el diferencial de ángulo sólido en la dirección del momento asintótico del fotoelectrón.

III. RESULTADOS

En primer lugar estudiamos los resultados obtenidos con nuestro modelo para las distribuciones angulares de fotoelectrones (PADs) en la fotoionización monocromática para el blanco molecular H_2^+ . Los resultados obtenidos se comparan con cálculos ab-initio donde la TDSE se resuelve numéricamente en coordenadas esféricas, dentro de la aproximación de núcleos fijos⁽¹⁶⁾. Consideramos dos energías diferentes y tres polarizaciones.

Los estados iniciales ligados se obtuvieron haciendo un Restricted Open-Shell Hartree-Fock mediante el paquete GAMESS⁽¹⁷⁾. Utilizando una expansión

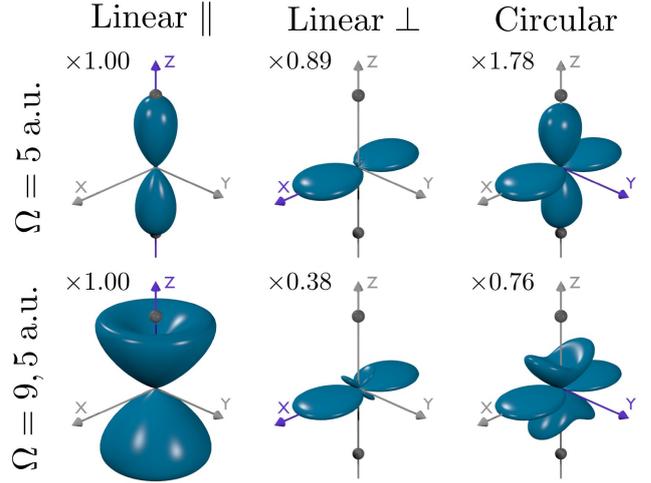


Figura 1: PADs monocromáticos para el estado fundamental $1s$ de H_2^+ con $R = 2$ a.u. y polarizaciones lineales paralelas y perpendiculares a \mathbf{R} , así como polarización circular. Los núcleos se indican mediante esferas grises. En los casos de polarización lineal, el vector de polarización se indica mediante un eje de color diferente (violeta). Para polarización circular, el eje violeta indica la dirección de incidencia. Los PADs (en verde-azul) se calcularon para energías del fotón XUV $\Omega = 5$ a.u. y $9,5$ a.u.

STO-6G⁽¹⁸⁾, fue posible emplear una base de STOs de tamaño medio $[4s2p1d]$ con funciones de polarización⁽¹⁹⁾. Fijando el valor de la separación internuclear en su valor de equilibrio ($R = 2$ a.u.), el potencial de ionización obtenido resulta $I_p = 1,1019$ a.u.

En la Fig. 1 se presentan las PADs para dos energías diferentes del fotón XUV con polarización lineal paralela y perpendicular al vector de separación internuclear \mathbf{R} . Además se incluye el caso de polarización circular derecha.

Para polarización lineal perpendicular, se observan lóbulos extras en direcciones diferentes a la de polarización, indicando la presencia de interferencias por emisión coherente desde ambos centros y que pueden relacionarse a los patrones obtenidos en experimentos de doble rendija de Young^(7,20). Para la menor de las energías consideradas, la longitud de onda de los fotoelectrones generados es levemente superior a la separación internuclear e incluso en este caso se observan pequeños lóbulos.

Cuando la polarización es paralela al vector de separación internuclear, se observa un comportamiento diferente. En general, los fotoelectrones serán emitidos en la dirección dada por el vector de polarización. Sin embargo, para $\Omega = 9,5$ a.u. la emisión en esta dirección esta parcialmente inhibida. Esto puede ser asociado con el efecto de confinamiento que aparece cuando la energía del fotoelectrón satisface aproximadamente la relación $pR \sim l\pi$, siendo l un número impar arbitrario. Asimismo, este efecto de confinamiento puede ser entendido en términos de mínimos en las contribuciones en ondas parciales para un l particular^(7,8,20). Alternativamente, este fenómeno puede ser entendi-

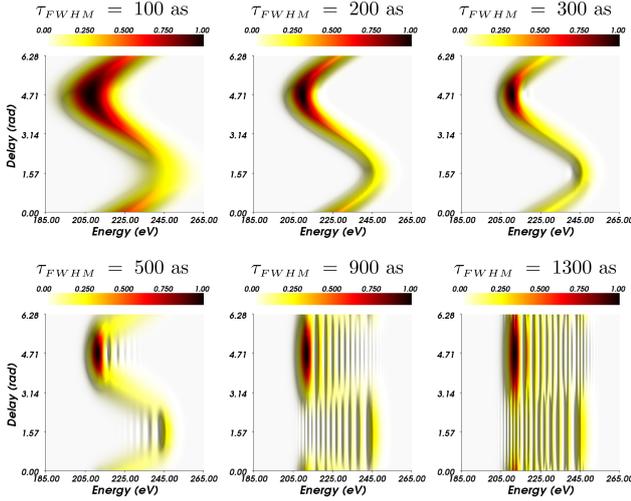


Figura 2: Espectro delay-energía para H_2^+ con $R = 2$ a.u., ionizado mediante pulso XUV con polarización lineal y $\Omega = 9,5$ a.u., en presencia de un NIR linealmente polarizado e intensidad $I_L = 3,5 \times 10^{12}$ W/cm².

do como un análogo molecular del mínimo de Cooper atómico⁽²¹⁾.

El caso de polarización circular derecha, se obtiene al fijar el vector de polarización $\mathbf{\Pi}(\phi) = \cos(\phi) \mathbf{e}_z + i \sin(\phi) \mathbf{e}_x$ con $\phi = -\pi/4$ y posee las características salientes de ambas polarizaciones lineales, junto con una torsión^(13,16). Así, la torsión mencionada anteriormente viene dada por el producto cruzado de las amplitudes de transición en cada una de las direcciones de polarización⁽¹³⁾ y su contribución resulta tres veces menor comparada con cálculos ab-initio⁽¹⁶⁾.

Para todas las energías y polarizaciones consideradas se obtuvo un acuerdo cualitativo con cálculos ab-initio^(16,20).

En la Fig. 2 se muestran los espectros delay-energía en lo que se denomina geometría de detección paralela ($\theta_e = 0$), para la reacción de fotoionización asistida por un campo láser en el infrarrojo cercano. Se puede apreciar que el momento asintótico de los fotoelectrones oscila de igual manera que el NIR. Esto puede entenderse clásicamente mediante la expresión $\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 - \mathbf{A}_L(t_0)$, que se obtiene al considerar al fotoelectrón en el continuo como una partícula cargada clásica y en ausencia de la interacción coulombiana con el blanco residual. $\mathbf{p}_0 = \sqrt{2(\Omega - I_p)}$ es el momento que adquiere un electrón ionizado al absorber un fotón XUV en ausencia del campo láser asistente y $\mathbf{A}_L(t_0)$ es el valor instantáneo del campo láser asistente al momento de producirse la ionización.

Cuando τ_{FWHM} es aproximadamente menor a $T_L/5$ (fila superior en Fig. 2) los espectros muestran las características mencionadas anteriormente. En cambio si $\tau_{FWHM} > T_L/5$ (fila inferior en Fig. 2) comienzan a aparecer bandas laterales (sidebands) debido a que existen múltiples caminos cuánticos que conducen al mismo estado final. Conforme se aumenta la duración del pulso XUV, estas estructuras comienzan a poblar todo el espectro. Cuando la duración del pulso XUV

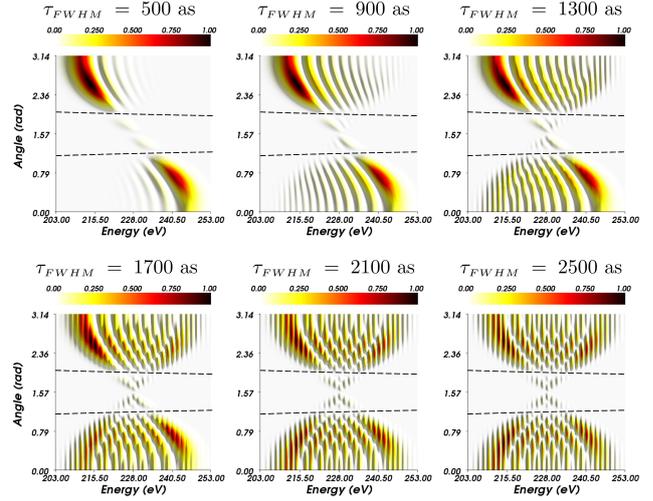


Figura 3: Espectro ángulo-energía para H_2^+ con delay $t_0 = \pi/2$. El resto de los parámetros coinciden con los de Fig. 2.

es superior al período del campo láser, se espera que el espectro este compuesto por sidebands cuya separación en energía sea ω_0 y que no se observe dependencia con el delay.

Por otro lado, se sabe que al existir una dependencia del espectro con el delay la misma se traduce en asimetrías espaciales⁽¹³⁾. Para corroborar este comportamiento con pulsos XUV de larga duración es conveniente observar el comportamiento de los espectros ángulo-energía, para un delay determinado.

En la Fig. 3 se muestran el espectro de fotoelectrones para ionización mediante un pulso XUV con $\Omega = 9,5$ a.u., polarizado linealmente, en presencia de un NIR con idéntica polarización e intensidad $I_L = 3,5 \times 10^{12}$ W/cm², en función del ángulo de eyección θ_e y la energía del fotoelectrón. El delay entre el pulso XUV y el campo láser fue fijado en $t_0 = \pi/(2\omega_0)$. Se puede apreciar que conforme aumenta τ_{FWHM} del pulso XUV, las estructuras denominadas sidebands van poblando el espectro.

En el modelo de Walter y Briggs⁽²²⁾, las amplitudes de transición monocromáticas, desde un estado inicial $1s\sigma_g$, son proporcionales a $(\mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{p}) \cos(\mathbf{p} \cdot \mathbf{R}/2)$. Para polarización lineal, el primer factor se anula cuando $\mathbf{\Pi} \perp \mathbf{p}$, que coincide con lo observado en la Fig. 3, para $\theta_e = \pi/2$. El segundo factor, que proviene de las contribuciones por emisión coherente desde ambos centros moleculares, se anula cuando $pR \cos \theta_e = (2n + 1)\pi$. Los ángulos, en función de la energía del fotoelectrón, que satisfacen la relación anterior se muestran en líneas de trazos en la Fig. 3.

El espectro de la Fig. 3 con $\tau_{FWHM} = 2500$ as muestra ciertas similitudes con el caso de átomos ionizados desde un orbital p hacia un orbital d en el continuo mediante FELs de frecuencias similares, en presencia de un campo láser asistente⁽²³⁾. No obstante, en el caso atómico se tienen probabilidades no nulas de emisión en la dirección $\theta_e = \pi/2$ y los ceros observados para otros ángulos de emisión se deben a

la anulación del armónico esférico correspondiente, a diferencia del caso molecular estudiado donde dichos ceros provienen de interferencias por emisión coherente desde ambos centros moleculares.

Por otro lado para la mayor duración considerada, se puede apreciar como desaparecen las asimetrías para emisión arriba-abajo ($\theta_e = 0, \pi$ rad), de acuerdo con lo esperado. Conforme la duración se hace cada vez mayor, la separación en energía de los sidebands se acerca a ω_0 .

IV. CONCLUSIONES

Calculamos mediante un modelo simple los espectros de fotoionización asistida por laser en el infrarrojo cercano del ion molecular H_2^+ . Analizamos los efectos de interferencia por emisión coherente desde ambos centros e interferencias introducidas por presencia del campo láser asistente. Mostramos como el aumento de la duración del pulso XUV da lugar a interferencias temporales que se traducen en espectros con estructuras de bandas laterales. De acuerdo a lo esperado, los espectros mostraron una menor dependencia con el delay para los pulsos XUV de mayor duración. Luego, analizamos los espectros ángulo-energía para distintas duraciones del pulso XUV, donde el origen de los ceros en dichos espectros fue analizado mediante un modelo más simple. Para duraciones τ_{FWHM} similares al período del campo láser asistente, se comparó el espectro con los resultados para el caso atómico. Asimismo, se pudo observar como las distribuciones angulares se hacen simétricas y la separación entre sidebands tiende a ω_0 conforme τ_{FWHM} se aumenta hasta valores cercanos al período del campo láser asistente.

V. Agradecimientos

Este trabajo fue financiado parcialmente por la ANPCYT (PICT No. 2145) y el CONICET (PIP No. 11220090101026) de la República Argentina. DIRB agradece la ayuda económica otorgada por la Fundación Josefina Prats.

Referencias

- 1 - P. M. Paul, E. S. Toma, P. Breger, G. Mullot, F. Aug, Ph. Balcou, H. G. Muller, and P. Agostini. *Science*, 292(5522): 1689–1692, 2001.
- 2 - G. Laurent, W. Cao, H. Li, Z. Wang, I. Ben-Itzhak, and C. L. Cocke. *Phys. Rev. Lett.*, 109:083001, Aug 2012.
- 3 - M. F. Kling, Ch. Siedschlag, A. J. Verhoef, J. I. Khan, M. Schultze, Th. Uphues, Y. Ni, M. Uiberacker, M. Drescher, F. Krausz, and M. J. J. Vrakking. *Science*, 312(5771): 246–248, 2006.
- 4 - F. Kelkensberg, W. Siu, J. F. Pérez-Torres, F. Morales, G. Gademann, A. Rouzée, P. Johnsson, M. Lucchini, F. Calegari, J. L. Sanz-Vicario, F. Martín, and M. J. J. Vrakking. *Phys. Rev. Lett.*, 107:043002, Jul 2011.
- 5 - X. M. Tong and C. D. Lin. *Phys. Rev. A*, 73:042716, Apr 2006.

- 6 - M F Ciappina, O A Fojn, and R D Rivarola. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 47(4): 042001, 2014.
- 7 - J. Fernández, O. Fojón, A. Palacios, and F. Martín. *Phys. Rev. Lett.*, 98(4):043005, Jan 2007.
- 8 - J. Fernández, O. Fojón, and F. Martín. *Phys. Rev. A*, 79 (2):023420, Feb 2009.
- 9 - S. X. Hu, L. A. Collins, and B. I. Schneider. *Phys. Rev. A*, 80:023426, Aug 2009.
- 10 - Alicia Palacios, Alberto González-Castrillo, and Fernando Martín. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 47(12):124013, 2014.
- 11 - G L Yudin, S Chelkowski, and A D Bandrauk. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 39(2):L17, 2006.
- 12 - G L Yudin, S Patchkovskii, P B Corkum, and A D Bandrauk. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 40(5):F93, 2007.
- 13 - Diego I. R. Boll and Omar A. Fojón. *Phys. Rev. A*, 90: 053414, Nov 2014.
- 14 - H.R. Reiss. *Progress in Quantum Electronics*, 16(1):1 – 71, 1992.
- 15 - A K Kazansky and N M Kabachnik. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 40(11):2163, 2007.
- 16 - Xiaoxu Guan, Ryan C. DuToit, and Klaus Bartschat. *Phys. Rev. A*, 87:053410, May 2013.
- 17 - Michael W. Schmidt, Kim K. Baldridge, Jerry A. Boatz, Steven T. Elbert, Mark S. Gordon, Jan H. Jensen, Shiro Koseki, Nikita Matsunaga, Kiet A. Nguyen, Shujun Su, Theresa L. Windus, Michel Dupuis, and John A. Montgomery. *Journal of Computational Chemistry*, 14(11):1347–1363, 1993.
- 18 - Robert F. Stewart. *The Journal of Chemical Physics*, 52 (1):431–438, 1970.
- 19 - I. Ema, J. M. García de la Vega, G. Ramírez, R. López, J. Fernández Rico, H. Meissner, and J. Paldus. *J. of Comp. Chem.*, 24(7):859–868, 2003.
- 20 - J. Fernández, F. L. Yip, T. N. Rescigno, C. W. McCurdy, and F. Martín. *Phys. Rev. A*, 79:043409, Apr 2009.
- 21 - R. Della Picca, P. D. Fainstein, M. L. Martiarena, and A. Dubois. *Phys. Rev. A*, 77:022702, Feb 2008.
- 22 - Michael Walter and John Briggs. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 32(11):2487, 1999.
- 23 - A. K. Kazansky, I. P. Sazhina, and N. M. Kabachnik. *Phys. Rev. A*, 82:033420, Sep 2010.