

Kvantumos összefonódottság vizsgálata atomi elektron erős lézertérben történő újraszóródása során

Tudományos diákköri dolgozat

Készítette:

Majorosi Szilárd

Fizikus MSc szakos hallgató

Témavezető:

Dr. Czirják Attila

tudományos munkatárs, c. egyetemi docens

Szegedi Tudományegyetem

Elméleti Fizikai Tanszék

Szeged, 2012

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	2
2. Atomok kölcsönhatása elektromágneses mezővel	3
2.1. Az elektromágneses mezőt leíró mennyiségek	3
2.2. Egyelektronos atomok elektromágneses térben	4
2.3. Időfüggő Schrödinger-egyenlet hossz és sebesség mértékben	6
3. Atomok intenzív lézertérben	8
3.1. Magasabb rendű felharmonikusok keltése	9
3.2. Szabad elektron lézertérben, Volkov állapot	10
3.3. Időben periodikus Hamilton-operátor, Floquet-elmélet	11
4. Időfüggő Schrödinger-egyenlet numerikus megoldása	14
4.1. Egyetlen aktív elektron közelítés (SAE)	14
4.2. Hamilton operátor, időfejllesztés	15
4.3. Modell potenciálok	16
4.4. Crank-Nicolson módszer	18
4.5. Numerov módszer	19
4.6. Számítógépes implementáció	20
4.7. Tesztelés	22
5. A numerikus módszeren alapuló eredmények	24
5.1. Modell	24
5.2. Kvantumos dinamika a fázistéren: Wigner függvény	25
5.3. Dipólusmomentum időfüggése, magas harmonikusok keltése	28
5.4. Kvantumos összefonódottság az elektron és az ion mozgása között	32
6. Összefoglalás	35
Hivatkozások	36

1. Bevezetés

Az attoszekundumos fizika [1] egyik legfontosabb, legalapvetőbb folyamata az atomi elektron újraszóródása [2] erős lézerimpulzus hatására: az atom ionizálódik, majd az elektromos tér irányváltását követően, a mezőből energiát nyerve, az elektron újra kölcsönhatásba kerül azzal az ionnal, amit éppen elhagyott. Ez a folyamat alapvetően kétféle eredménnyel végződhet. Ha az ion befogja az elektront, akkor az eközben kibocsájtott, XUV spektrum tartományba eső fotonok segítségével attoszekundumos fényimpulzusok állíthatók elő, amelyek ma már a 100 as-nál ($1 \text{ as} = 10^{-18} \text{ s}$) is rövidebbek. Ha viszont az újraszóródás során az elektron az ionon (elasztikusan vagy inelasztikusan) szóródik [3, 4, 5, 6, 7], akkor az iont vagy az elektront detektálva információt nyerhetünk az egész folyamat kvantumos jellemzőiről [8, 9].

Dolgozatunkban egy ilyen újraszóródási folyamat kvantummechanikai vizsgálatát végezzük el az időfüggő Schrödinger-egyenlet numerikus megoldására alapozva. A 2. fejezetben először röviden összefoglaljuk az egyelektronos atomok és elektromágneses mező közötti kölcsönhatások kvantummechanikai elméletét, majd a 3. fejezetben külön tárgyaljuk az intenzív lézerterekben történő folyamatokat is. Ezek után, a 4. fejezetben, felírjuk a folyamatokat egydimenzióban modellező egyenleteket, diszkretizáljuk őket, majd ismertetjük azt a numerikus módszert, amellyel megoldjuk a diszkretizált egyenleteket. Itt ismertetjük az általunk elkészített számítógépes programot és tesztelési eredményeit is.

Végül, az 5. fejezetben a program alkalmazásával elért szimulációs eredményeket mutatjuk be. Az újraszóródás kvantumos dinamikáját Wigner függvények segítségével értelmezzük, a magas harmonikus keltés folyamatának időbeli szerkezetébe pedig wavelet analízis segítségével nyerünk betekintést. Megvizsgáljuk a kvantumos összefonódottság mértékének az időbeli fejlődését, ez ugyanis fontos jellemzője annak, hogy az egyik részecskén végrehajtott mérés mennyi információt képes nyújtani a vele kölcsönható másik részecskéről.

2. Atomok kölcsönhatása elektromágneses mezővel

Ebben a fejezetben a általános atomfizikai háttérismereteket foglaljuk össze egy atomi rendszer és erős elektromágneses tér közötti kölcsönhatásával kapcsolatban.

2.1. Az elektromágneses mezőt leíró mennyiségek

A lézertér-atom kölcsönhatás leírása szempontjából fontos klasszikus elektrodinamikai összefüggéseket összefoglaljuk össze a következőkben.

Az elektromágneses mezőt jellemző két fő mennyiség, az $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ elektromos térerősség és $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ mágneses indukció vektora. Ez a kettő nem független egymástól, kapcsolatukat a Maxwell egyenletek írják le. Nagyon hasznosnak bizonyult az $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ vektorpotenciál és a $\phi(\mathbf{r}, t)$ skalárpotenciál bevezetése is, amelyek az alábbi kapcsolatban állnak az elektromos és a mágneses mezővel:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \nabla\phi(\mathbf{r}, t) \quad (2.1)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \quad (2.2)$$

További fontos tulajdonsága az $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ és $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ mennyiségnek, hogy invariánsak a klasszikus mértéktranszformációra. Legyen $\chi(\mathbf{r}, t)$ valós, differenciálható függvény. Klasszikus mértéktranszformáció a következő leképezés:

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi \quad \text{és} \quad \phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial\chi}{\partial t} \quad (2.3)$$

$\chi(\mathbf{r}, t)$ -t a mértéktranszformáció generátorfüggvényének nevezik.

Az olyan mértéket, amelyben $\nabla\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0$ feltétel teljesül, Coulomb-mértéknek szokás nevezni. Jelentősége, hogy a Maxwell-egyenletekből a $\phi = 0$ feltételezéssel élve

$$\nabla^2\mathbf{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{A}}{\partial t^2} = 0 \quad (2.4)$$

hullámegyenletet kapjuk, ahol c a fény terjedési sebessége vákuumban. Ennek a parciális differenciálegyenletnek jellegzetes megoldásai a ω körfrekvenciával jellemzett monokromatikus síkhullámok, amelyek

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = A_0(\omega)\hat{\mathbf{e}}\cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \delta_\omega) = A_0(\omega)\hat{\mathbf{e}} \cdot \text{Re} [e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t + i\delta_\omega}] \quad (2.5)$$

alakúak, ahol $\hat{\mathbf{e}}$ a polarizációs vektor, $\mathbf{k}$ a (kör)hullámszám vektor és δ_ω konstans fázis.

Általános esetben a külső elektromágneses tér időfüggése a síkhullám megoldások szuperpozíciójaként áll elő, ha ugyanazon $\hat{\mathbf{k}}$ egységvektor irányába terjednek és $\hat{\mathbf{e}}$ vektor

irányában lineárisan polarizáltak [10]:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{e}} \int_0^\infty A_0(\omega) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t + \delta_\omega) d\omega \quad (2.6)$$

A fizikai szempontból gyakran használt közelítés a következő: a monokromatikus elektromágneses síkhullámokat leíró $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ tagot sorba fejthetjük

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{1}{s!} (i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})^s = 1 + (i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \frac{1}{2!} (i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})^2 + \dots \quad (2.7)$$

és a következő egyszerűsítést tehetjük: ha $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \ll 1$, ekkor $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \approx 1$ eredményt kapjuk. Ezt nevezzük dipólus-közelítésnek.

A fizikai tartalma az optikai átmeneteknél: az atomi hullámfüggvény az első Bohr-sugár néhányszorosaig terjed ki, ez legfeljebb $r \approx 0.5 \text{ nm}$, amíg az átmenetre jellemző fényhullámhosszak 500-800 nm körüliek $k = 2\pi/500 \text{ nm}^{-1}$ hullámszám vektorral, ezért $k \cdot r \ll 1$. Általánosabban megfogalmazva: ha az atomi hullámfüggvény lineáris kiterjedése r , és az elektromágneses tér hullámszámvektorának nagysága k és érvényes $k \cdot r \ll 1$, akkor a $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \approx 1$ helyettesítéssel élhetünk. Ez a hosszú hullámú közelítés azt jelenti, hogy az atomi távolságokon az elektromágneses mező térbeli függésétől eltekintünk.

A közelítés fontos következménye tehát, hogy az elektromágneses vektorpotenciál $\mathbf{A}(t)$ és elektromos mező $\mathbf{E}(t)$ csak az időtől függ. Ezért a (2.2) összefüggésből adódóan a mágneses indukció eltűnik, azaz $\mathbf{B}(t) = 0$.

2.2. Egyelektronos atomok elektromágneses térben

A töltött részecske és elektromágneses mező kölcsönhatását félklasszikusan írjuk le: a külső teret klasszikusan, míg az elektronokat kvantummechanikailag kezeljük. Nem vesszük figyelembe a spint. A fizikai alkalmazások, szimulációk szempontjából egyedi jelentőséggel bírnak az egyelektronos atomok. Egyelektronos atomban (vagy ionban) $Z \cdot e$ töltésű és M tömegű atommag található és egy $q = -e$ töltésű, m tömegű elektron. Ilyenek a hidrogén-szerű rendszerek, például H, He^+ .

Ezek alapján egy q töltésű és m tömegű töltött részecske Hamilton-operátora elektromágneses térben:

$$H = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2 + q\phi. \quad (2.8)$$

Elektron esetén $q = -e$. Elvégezve a négyzetre emelést a Hamilton-operátorban

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{q}{2m} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 + q\phi \quad (2.9)$$

alakot kapjuk. Koordináta reprezentációt használva az impulzus operátor $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ alakú, ezt behelyettesítve (2.9) Hamilton-operátorba az időfüggő Schrödinger-egyenlet a

következő alakot ölti

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i\hbar \frac{q}{2m} (\mathbf{A} \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 + q\phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.10)$$

Belátható, hogy ez az egyenlet invariáns a következő mértéktranszformációra:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) - \nabla \chi(\mathbf{r}, t) \quad (2.11)$$

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \phi'(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial}{\partial t} \chi(\mathbf{r}, t) \quad (2.12)$$

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi'(\mathbf{r}, t) \cdot e^{i\frac{q}{\hbar} \chi(\mathbf{r}, t)} \quad (2.13)$$

A (2.10) egyenletet Coulomb mértékben felírva és $\phi = 0$ választással élve:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + i\hbar \frac{q}{m} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{q^2}{2m} \mathbf{A}^2 \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.14)$$

mert a

$$\nabla (\mathbf{A} \Psi) = \mathbf{A} \cdot (\nabla \Psi) + (\nabla \cdot \mathbf{A}) \Psi = \mathbf{A} \cdot (\nabla \Psi) \quad (2.15)$$

vektori azonosságot alkalmaztuk.

Az időfüggő Schrödinger-egyenlet egyelektronos atomok esetén

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = [H_0 + H_{\text{kh}}(t)] \cdot \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.16)$$

ahol teljes Hamilton-operátort $H(t) = H_0 + H_{\text{kh}}(t)$ kifejezés adja meg. H_0 a külső elektromágneses rész nélküli időfüggetlen Hamilton-operátor:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z \cdot e^2}{r} \quad (2.17)$$

Jól látható, hogy H_0 foglalja magában a kinetikus energiát és a Coulomb potenciált tartalmazó részt. A valencia elektron és az elektromágneses mező közti kölcsönhatást a

$$H_{\text{kh}}(t) = \frac{e}{m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2 = -i\hbar \frac{e}{m} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2 \quad (2.18)$$

Hamilton-operátor írja le.

2.3. Időfüggő Schrödinger-egyenlet hossz és sebesség mértékben

Ebben a pontban alkalmazunk két ismert mértéktranszformációt és a dipólus közelítést az egyelektronos atomokat leíró időfüggő Schrödinger-egyenletre. Ezek segítségével a megoldandó egyenletek tovább egyszerűsödnek.

Írjuk fel az egyelektronos atom időfüggő Schrödinger-egyenletét mint

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[H_0 + \frac{e}{m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2 \right] \cdot \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.19)$$

Csak dipólus közelítést alkalmazva, $\mathbf{A}^2(t)$ -et tartalmazó tag kiküszöbölhető, a következő mértéktranszformációval:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi^V(\mathbf{r}, t) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{e^2}{2m} \int^t \mathbf{A}^2(t') dt'} \quad (2.20)$$

Ez $\Psi^V(\mathbf{r}, t)$ -re egy új időfüggő Schrödinger-egyenletet ad

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^V(\mathbf{r}, t) = \left[H_0 + \frac{e}{m} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{p} \right] \cdot \Psi^V(\mathbf{r}, t) \quad (2.21)$$

Erre az egyenletre azt mondjuk, hogy sebesség mértékben (velocity gauge) van felírva, mert

$$H_{\text{kh}}^V(t) = \frac{e}{m} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{p} = -i \frac{\hbar e}{m} \mathbf{A}(t) \cdot \nabla \quad (2.22)$$

kölcsönhatási tagban a $\mathbf{A}(t)$ vektor potenciál a $\mathbf{p}/m$ sebességoperátorral csatolva jelenik meg.

A (2.19) egyenletnek dipólus közelítéssel egy másik egyszerűsített alakja is nyerhető, ha alkalmazzuk rá a $\chi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{r}$ generátorfüggvényű mértéktranszformációt, akkor a (2.11) - (2.13) egyenletek felhasználásával

$$\mathbf{A}^L(\mathbf{r}, t) = \mathbf{0} \quad (2.23)$$

$$\phi^L(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{r} = -\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r} \quad (2.24)$$

$$\Psi^L(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t) \cdot e^{i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{r}} \quad (2.25)$$

Ez $\Psi^L(\mathbf{r}, t)$ -re egy új időfüggő Schrödinger-egyenletet ad

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^L(\mathbf{r}, t) = [H_0 + e \mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r}] \cdot \Psi^L(\mathbf{r}, t) \quad (2.26)$$

Erre az egyenletre azt mondjuk, hogy hossz mértékben (length gauge) van felírva, mert

$$H_{\text{kh}}^L(t) = e \mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r} = -\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{D} \quad (2.27)$$

kölcsönhatási tagban a $\mathbf{A}(t)$ vektor potenciál a $\mathbf{D} = -e \cdot \mathbf{r}$ elektromos dipólusmomentum operátorral csatolva jelenik meg.

Ezen két mértékben kapott egzakt megoldások ekvivalensek. Azonban, ha valamilyen közelítő eljárást alkalmazunk a hossz- és sebességmértékben az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldására, a kétféle mértékben felírt megoldás nem feltétlenül esik egybe. Ezen jelenséggel bővebben a 4.2. pontban foglalkozunk.

3. Atomok intenzív lézertérben

Ha az atomokkal kölcsönható külső elektromágneses mező elegendően nagy intenzitású, magasabb rendű folyamatok játszódhatnak le, az úgynevezett többfotonos folyamatok. Ekkor az atom vagy molekula elektronjai több foton abszorpciójával vagy emissziójával is más állapotba kerülhetnek. Például atom vagy molekula kötött állapotból egy nagyobb energiájú kötött állapotba juthat 2-nél több foton elnyelésével - ez a többfotonos gerjesztés (MPE). Ennek ellenkezője is megtörténhet: az atom vagy molekula alacsonyabb energiájú állapotba juthat több foton spontán vagy kényszerített emissziójával. Természetesen más típusú többfotonos folyamatok is léteznek, például a többfotonos ionizáció, molekulák esetén többfotonos disszociáció. Intenzív lézertérrel kölcsönható atomi vagy molekuláris rendszer a lézer frekvenciájának egész számú többszörös frekvenciájú felharmonikusait is kisugározhatja, ezt a folyamatot magasabb rendű harmonikus keltésnek (HHG) nevezik az irodalomban [10].

A többfotonos folyamatok kísérleti megfigyelése intenzív elektromágneses térben lehetséges. Rövid impulzusokat kibocsájtó lézerekkel sikerült olyan intenzitásokat elérni, amelyek az elektromos térerősség E_a atomi egységével jellemezhetőek:

$$I_a = \frac{1}{2} \epsilon_0 c E_a^2 \approx 3,5 \cdot 10^{16} \text{ W cm}^{-2} \quad (3.1)$$

$$E_a = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{a_0^2} \approx 5,1 \cdot 10^{11} \text{ V m}^{-1} \quad (3.2)$$

ahol E_a az atomi Coulomb-tér erőssége a hidrogén első Bohr-sugarának távolságában (a_0). Az ilyen erősségű külső elektromágneses terek képesek az atomi Coulomb-erőkkel versenyre kelni, és irányítani az atomok és molekulák dinamikai folyamatait. Ha a lézertér intenzitása $I \ll I_a$, akkor a többfotonos folyamatok tanulmányozhatók időfüggő perturbációszámítás segítségével, azonban ebben a dolgozatban csak nemperturbatív módszerekkel foglalkozunk.

A folyamatokat intenzív lézerterek esetén is félklasszikus módon tárgyaljuk: a lézertér klasszikusan, az atomi rendszert a kvantummechanika segítségével írjuk le. Például: $\hbar\omega = 1,17 \text{ eV}$ foton energiájú Nd:YAG $I = 10^{12} \text{ W cm}^{-2}$ intenzitású $V = \lambda^3 = (1064 \text{ nm})^3$ koherenciatérfogatú lézertér fotonszáma

$$N = \frac{IV}{\hbar\omega} \approx 10^8. \quad (3.3)$$

Továbbá feltesszük, hogy a lézersugárzás koherens állapotban van: ekkor nagy átlagos fotonszám esetén a kvantumelektrodinamikai korrekciók csak kis fluktuációkat okoznak az $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ vektorpotenciálban. Ezért elegendő a lézertér klasszikus leírása [10].

A tárgyalásunkban a relativisztikus és a nem-dipólus effektusokat elhanyagoljuk - ezek

csak ultra-nagy intenzitásoknál játszanak szerepet. A dipólus közelítést fogjuk alkalmazni és a lézerteret lineárisan polarizáltnak tekintjük, továbbá térerősségének időfüggését a következő alakúnak tételezzük fel:

$$\mathbf{E}(t) = \hat{\mathbf{e}} E_0 \cdot F(t) \sin(\omega t + \delta) \quad (3.4)$$

ahol $\hat{\mathbf{e}}$ egységnyi polarizációs vektor, E_0 az elektromos térerősség amplitúdója, $F(t)$ az impulzus burkológörbéje és δ a sugárzás fázisa. Lineárisan polarizált monokromatikus mező esetén egyszerűbb alakot kapunk:

$$\mathbf{E}(t) = \hat{\mathbf{e}} E_0 \cdot \sin(\omega t + \delta). \quad (3.5)$$

Ehhez a térerősséghez tartozó vektorpotenciál pedig $\mathbf{A}(t) = \hat{\mathbf{e}} A_0 \cos(\omega t + \delta)$ és $A_0 = E_0/\omega$ összefüggésekkel adható meg.

3.1. Magasabb rendű felharmonikusok keltése

Erős lézertérrel kölcsönható atomi rendszer képes kisugározni a gerjesztő lézer ω körfrekvenciájának magasabb rendű harmonikusait. Ennek klasszikus elektrodinamikai magyarázata, hogy elektromágneses mező hatására a rendszer elektronjainak sebessége változik, ezért - mint gyorsuló töltések - sugárzást bocsátanak ki. Az atom inverziós szimmetriája miatt a felharmonikusok Ω frekvenciái csak gerjesztő lézer körfrekvenciájának páratlan számú többszörösei lehetnek:

$$\Omega = q\omega, \quad q = 3, 5, \dots \quad (3.6)$$

Ez a jelenség kísérletileg már igazolást nyert [10]. A következőekben mikroszkopikusan vizsgáljuk a felharmonikus keltést. Az elektron oszcillációk jellemzésére vezessük be a lézer-indukált dipólusmomentumot

$$\mathbf{d}(t) = \langle \Psi(t) | -e\mathbf{r} | \Psi(t) \rangle \quad (3.7)$$

amely a $\mathbf{D} = -e \cdot \mathbf{r}$ elektromos dipólusmomentum operátor várható értéke a $\Psi(\mathbf{r}, t)$ hullámfüggvénnyel jellemzett $|\Psi(t)\rangle$ állapotban. Legyen

$$\mathbf{a}(t) = \frac{d^2}{dt^2} \mathbf{d}(t) = \ddot{\mathbf{d}}(t) \quad (3.8)$$

az indukált dipólus momentumgyorsulása. Időbeli deriválás nélkül is megadhatjuk $\mathbf{a}(t)$ -t, ha alkalmazzuk a kvantummechanikai Ehrenfest tételt [11]:

$$\mathbf{a}(t) = -\frac{e}{m} \frac{d \langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = \frac{e}{m} \langle \nabla V(\mathbf{r}, t) \rangle \quad (3.9)$$

Ezen formula numerikus számítások során történő használata kevesebb pontatlansággal jár [12]. A kibocsájtott sugárzás teljesítmény spektruma arányos az $|\mathbf{a}(\Omega)|^2$ mennyiséggel, amelyben

$$\mathbf{a}(\Omega) \propto \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{a}(t) e^{-i\Omega t} dt, \quad (3.10)$$

azaz $\mathbf{a}(\Omega)$ megadható $\mathbf{a}(t)$ Fourier transzformáltjával [10, 12].

3.2. Szabad elektron lézertérben, Volkov állapot

Erős terek fizikájában fontos eset, amikor egy „szabad” elektron hat kölcsön egy $\mathbf{A}(t)$ vektorpotenciállal jellemzett intenzív elektromágneses mezővel - dipólus közelítésben. Ezen eset analitikusan is megoldható a perturbációs számítás nélkül.

A rendszert leíró időfüggő Schrödinger-egyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 \cdot \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (3.11)$$

A probléma egyszerűsítése érdekében transzformáljuk az (3.11) egyenletet sebességmértékbe. Ezután

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^V(\mathbf{r}, t) = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{e}{m} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{p} \right] \cdot \Psi^V(\mathbf{r}, t) \quad (3.12)$$

Mivel a $\mathbf{p} = -i\hbar \nabla$ impulzus operátornak $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ függvények sajátfüggvényei $\hbar \mathbf{k}$ sajátértékekkel (itt $\mathbf{k}$ az elektron hullámszám vektora), ezért a (3.12) egyenlet megoldásait a

$$\Psi_{\mathbf{k}}^V(\mathbf{r}, t) = f(t) \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (3.13)$$

alakban keressük. Ezt visszahelyettesítve (3.12) egyenletbe elsőrendű közönséges differenciál egyenletet kapunk:

$$i\hbar \frac{d}{dt} f(t) = \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{e\hbar}{m} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{k} \right] \cdot f(t) \quad (3.14)$$

Ezen egyenlet megoldásának általános alakja

$$f(t) = C \cdot e^{-i \frac{\hbar k^2}{2m} t} e^{-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\alpha}(t)}, \quad (3.15)$$

ahol C normálásból adódó konstans és $\boldsymbol{\alpha}(t) = \frac{e}{m} \int^t \mathbf{A}(t') dt'$.

Ezek után visszahelyettesítve a (3.12) időfüggő Schrödinger-egyenletbe, a teljes megoldás meghatározható, amelyet (nemrelativisztikus) Volkov hullámfüggvénynek neveznek:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^V(\mathbf{r}, t) = (2\pi)^{-3/2} \cdot e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot [\mathbf{r} - \boldsymbol{\alpha}(t)]} \quad (3.16)$$

ahol $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ elektron energiája és $C = (2\pi)^{-3/2}$, mert $\Psi_{\mathbf{k}}^V(\mathbf{r}, t)$ -t delta függvényre normáltuk.

Végül az eredeti (3.11) Schrödinger-egyenlet Volkov megoldása:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = (2\pi)^{-3/2} \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \cdot e^{i\mathbf{k} \cdot [\mathbf{r} - \boldsymbol{\alpha}(t)]} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{e^2}{2m} \int^t \mathbf{A}^2(t') dt'} \quad (3.17)$$

A Volkov állapotoknak számos alkalmazása van a többfotonos fizikában. Például lézertérben történő elektron-atom ütközések esetén megfeleltethetők elektromágneses mező nélküli elektron-atom ütközéseknél szerepet játszó síkhullámoknak [10].

Az intenzív lézerterekben lévő szabad elektronok egyik jellemző mennyisége a pondeomotoros energia, amely a klasszikusan mozgó elektron kinetikus energiája lézertérben, egy lézerperiódusra átlagolva. Nemrelativisztikus elektron sebességeknél, lineárisan polarizált monokromatikus tér esetén megadható mint

$$U_p = \frac{e^2 E_0^2}{4m\omega^2} \quad (3.18)$$

Mivel az I intenzitás arányos E_0^2 -el, ezért a pondeomotoros energia arányos I/ω^2 -el.

3.3. Időben periodikus Hamilton-operátor, Floquet-elmélet

A nemperturbatív módszerek közül jelentős szerepe van a Floquet-elméletnek. G. Floquet dolgozta ki az elméletet 1883-ban periodikus együtthatós differenciálegyenletek tanulmányozására. Kvantummechanikában ez az elmélet használható, ha a Hamilton-operátor periodikus térben vagy időben. Lézer-atom kölcsönhatások tanulmányozásakor az időbeli periodicitást használjuk fel. A Floquet-elmélet ilyen típusú alkalmazását J.H. Shirley indította el 1965-ben. Az elmélet lényege a következő: periodikus lézertér esetén az állapot változását leíró időfüggő Schrödinger-egyenlet kifejezhető mint végtelen darab csatolt időfüggetlen differenciálegyenlet, ahol az atom-mező csatolást nem perturbatíván kezeljük [10].

Legyen egy ω körfrekvenciájú monokromatikus lézertérünk valamilyen polarizációval, amely kölcsönhat egyelektronos atommal (a módszer természetesen általánosítható több elektronos rendszerre is). Ekkor az atom-lézertér rendszer Hamilton-operátora

$$H(t + T) = H(t) \quad (3.19)$$

alakú $T = 2\pi/\omega$ időbeli periódussal. Ekkor a Floquet-elmélet szerint a $\Psi(\mathbf{r}, t)$ hullámfüggvény felírható mint

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} F(\mathbf{r}, t), \quad (3.20)$$

ahol E egy időfüggetlen, kvázienergiának nevezett mennyiség és az $F(\mathbf{r}, t)$ függvény peri-

odikus időben T periódussal. Ekkor ez az $F(\mathbf{r}, t)$ függvény Fourier-sorba fejthető:

$$F(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-in\omega t} F_n(\mathbf{r}), \quad (3.21)$$

ahol $F_n(\mathbf{r})$ -t a $F(\mathbf{r}, t)$ függvény harmonikus komponenseinek szokás nevezni. Ennek segítségével a $\Psi(\mathbf{r}, t)$ Floquet-Fourier sora

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-in\omega t} F_n(\mathbf{r}). \quad (3.22)$$

A Hamilton-operátort is Fourier-sorba fejtve

$$H(t) = H_0 + H_{\text{kh}} = H_0 + \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-in\omega t} (H_{\text{kh}})_n. \quad (3.23)$$

Behelyettesítve (3.22) és (3.23) egyenletet a (2.16) alakú atomi időfüggő Schrödinger-egyenletbe, az $F_n(\mathbf{r})$ harmonikus komponensekre végtelen darab csatolt differenciál egyenletet kapunk

$$(E + n\hbar\omega - H_0) F_n(\mathbf{r}) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} (H_{\text{kh}})_{n-k} F_k(\mathbf{r}) \quad (3.24)$$

ahol $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Ezek az egyenletek a megfelelő peremfeltételekkel egy sajátérték-problémát alkotnak az E kvázi energiákra, amelyet formálisan felírhatunk mint

$$(\mathbf{H}_{\text{F}} - E)\mathbf{F} = 0, \quad (3.25)$$

ahol a Floquet Hamilton-operátor mátrix $\mathbf{H}_{\text{F}}$ egy olyan végtelen dimenziós mátrix, amelynek elemei lineáris operátorok. Gyakorlati megvalósításban azonban a (3.24) és (3.25) összefüggésekben csak véges összegekkel számolnak.

Megjegyzendő, hogy hossz- és sebesség-mértékben a Hamilton-operátor kölcsönható része a következő alakba írható

$$H_{\text{kh}}(t) = H_+ e^{-i\omega t} + H_- e^{i\omega t} \quad (3.26)$$

ahol H_+ és H_- időfüggetlen operátorok. Ekkor a csatolt Floquet egyenletek a következő alakra egyszerűsödnek

$$(E + n\hbar\omega - H_0) F_n(\mathbf{r}) = H_+ F_{n-1}(\mathbf{r}) + H_- F_{n+1}(\mathbf{r}) \quad (3.27)$$

azaz a $\mathbf{H}_{\text{F}}$ Floquet Hamilton-operátor mátrix tridiagonális lesz.

A (3.27) egyenlet megoldására gyakran szokták alkalmazni egyelektronos atomok esetén az úgynevezett Sturm-Floquet módszert. Ezen csatolt egyenletrendszer megoldható,

ha minden $F_n(\mathbf{r})$ harmonikus komponenst kifejtünk egy diszkrét bázisban:

$$F_n(\mathbf{r}) = \sum_{NLM} c_{NLM}^{(n)} r^{-1} S_{NL}^\kappa(r) Y_{LM}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (3.28)$$

ahol $Y_{LM}(\hat{\mathbf{r}})$ gömbfüggvények, κ egy komplex paraméter és $S_{NL}^\kappa(r)$ radiális függvények, az úgynevezett Sturm-függvények [10]. A Sturm-Floquet módszert többfotonos ionizáció és harmonikus keltés vizsgálatára sikeresen alkalmazták hidrogén-szerű atomi rendszereken monokromatikus és bikromatikus lézerterek esetén is [10].

4. Időfüggő Schrödinger-egyenlet numerikus megoldása

Az intenzív lézerterekben történő atomi folyamatokat egy úgynevezett „három lépéses” modellel szokás illusztrálni, amely már a klasszikus mechanika keretei között is meglepően jól megmagyarázza a főbb jellegzetességeket [13, 14]. A három lépés: (1) az elektron az iontörzs közvetlen közelében „születik” és ide is tér vissza, (2) ezek után az ion Coulomb tere nincs rá hatással, csak a lézer elektromos terében mozog, (3) ha visszatér az ionhoz és az befogja, akkor egy olyan fotont bocsájt ki, amelynek energiája megegyezik az elektron által a lézertérből nyert kinetikus energia és az ionizációs potenciál összegével. Ennek a modellnek a kvantummechanikai verziója a közelítő, de analitikus Lewenstein integrál [15], amely már finomabb részleteket is reprodukál. Ennek főbb közelítései az alábbiak: csak a kezdetben alapállapotban levő legkülső elektront vesszük figyelembe; az alapállapot betöltöttsége mindvégig 1 marad (bár erre vannak pontosítási lehetőségek); a kontinuumban levő elektronokra csak a lézertér hat, az ion Coulomb terét itt is elhanyagoljuk.

Egy atom intenzív lézertérrel történő kölcsönhatásának pontos kvantummechanikai tárgyalásához jelenlegi tudásunk alapján mindenképpen numerikus megoldásra van szükség. A teljes 3-dimenziós, több-elektronos probléma megoldására többféle numerikus módszer is ismert [16], azonban ezek nagyon jelentős, szuperszámítógépes erőforrásokat igényelnek, a kódok kifejlesztése tipikusan egy kutatócsoport több éves munkáját igényli, az eredmények értelmezése is komoly elméleti és numerikus munka. Sokat egyszerűsít a helyzeten, ha feltételezhetjük, hogy a lézertérrel csak egyetlen atomi elektron hat kölcsön, ezt a következő szakaszban részletesebben tárgyaljuk. További jelentős egyszerűsítés, ha egyetlen térdimenzióra szorítjuk meg a tárgyalást, ez azonban lineárisan polarizált lézerimpulzus esetén elég jó közelítésnek bizonyult. Ebben a fejezetben egy ilyen modell numerikus megoldásának alapjait vázoljuk fel.

4.1. Egyetlen aktív elektron közelítés (SAE)

Mint már korábban szó volt róla (2.2. pontban), egyetlen aktív elektron közelítésen (Single Active Electron Approximation - SAE) feltételezzük, hogy a vizsgált atomnak csak egyetlen elektronja hat kölcsön jelentősen a külső lézertérrel. Ezzel a közelítéssel azonban nem csak a szó szerint vett egyelektronos atomok vizsgálhatók. Alkálifémek, és egyszeresen ionizált alkáli földfémek esetén könnyen értelmezhető a dolog: a kölcsönható valencia elektron egy lezárt héjon kívül helyezkedik el. Azonban a SAE modell alkalmazhatósága ennél szélesebb körű, minden olyan esetre kiterjeszthető, ahol az atomi rendszer egyidejű többszörös gerjesztésének valószínűsége kicsi. Olyan ritka gázokra, ahol a valencia elektron egy betöltött héj része, számításokkal megmutatták, hogy a SAE jó közelítés, amennyiben a gerjesztő fotonok energiája lényegesen kisebb mint az elektron ionizálási energiája [16]. Ebben az esetben ugyanis először a kölcsönható („aktív”) elektron ionizálódik, és csak ezután után gerjesztődhet a többi elektron. A különböző elektronok megfigyelhető

menntiségekhez rendelhető járuléka, mint pl. időfüggő dipólmomentum vagy fotoelektron spektrum minden elektronra külön-külön kiszámolható és a számítás végén összegezhető (folyamattól függően koherens vagy inkohérens módon). Gyakran fennálló eset, hogy külső tér irányában polarizált elektron pályák (pl. z irányban polarizált lézer esetén $m = 0$ mágneses kvantumszámú atomi elektronpályák) sokkal nagyobb valószínűséggel ionizálhatók mint a többi elektron, ezáltal az ilyen jellegű számítások esetén megfelelő pontosság érhető el csak ezen pályák figyelembe vételével [16].

A nagy intenzitású lézerimpulzusokkal történő kísérletekben gyakorta használt hullámhosszakon (800 nm körül) a SAE kiváló közelítésnek bizonyult, kivéve az olyan eseteket, ahol kétszeresen gerjesztett állapotot rezonáns módon csatolja az alapállapothoz a lézer. A SAE legnagyobb hátránya az erős terek fizikájában az, hogy elhanyagolja annak valószínűségét, hogy az aktív elektron kölcsönhat a rendszer többi elektronjával, amely többszörös ionizációt eredményezhet. A SAE jelentős előnyei között szerepel, hogy a probléma komplexitását nagyban csökkenti, mint egyelektron közelítés, továbbá egy lineáris differenciálegyenletet eredményez, amely az erős terek fizikájára jellemző, szuperpozíció útján előálló megoldásokat megengedi (tipikusan kötött + kontinuum állapotok) [16].

4.2. Hamilton operátor, időfejlesztés

Az aktív atomi elektron állapotát leíró egydimenziós, koordináta reprezentációban lévő időfüggő Schrödinger-egyenlet (atomi egységekben)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = [H_0 + H_{\text{kh}}(t)] \cdot \Psi(x, t), \quad (4.1)$$

itt H_0 a külső elektromágneses rész nélküli időfüggetlen Hamilton-operátor:

$$H_0 = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0(x). \quad (4.2)$$

ahol $V_0(x)$ a magtól származó (időfüggetlen) potenciál, m pedig az aktív elektron redukált tömege.

Az elektromágneses kölcsönhatást leíró tag megfelelő mértékben történő felírása a numerikus számolások eredményére jelentős hatással van, szemben az analitikusan megoldható esetekkel, amikor csak egy meghatározott fázisfaktorban különbözik a két módon számolt hullámfüggvény. Következőkben dipólus közelítést alkalmazzuk és feltételezzük, hogy a mező x tengely irányában lineárisan polarizált.

Először a (4.1) egyenletet hosszsmértékben felírva a kölcsönhatási tag:

$$H_{\text{kh}}^{\text{L}}(t) = E(t) \cdot x, \quad (4.3)$$

ahol $E(t)$ a modellezett lézertér elektromos térerőssége. Ez a mérték javasolt az ionos mag

környezetében lejátszódó folyamatok tanulmányozására, itt a lézer-elektron kölcsönhatás viszonylag gyenge (még erős lézertér esetén is). Ha az ionizált elektron messzire távolodik a magtól, a lézer-elektron kölcsönhatás erőssége gyorsan növekszik. Ennek egyik kellemetlen következménye, hogy egyre kisebb időlépéseket kell használnunk, mert a diszkretizálásból adódó numerikus hibák felerősödnek ahogy távolodunk a magtól.

A (4.1) egyenletet sebességmértékben felírva a kölcsönhatási tag:

$$H_{\text{kh}}^V(t) = -i \frac{A(t)}{m} \frac{\partial}{\partial x} \quad (4.4)$$

alakú, a vektorpotenciált a térerősséggel pedig a $\partial A(t)/\partial t = -E(t)$ reláció köti össze [16]. Ez a mérték az ionos magtól távoli régiókban pontosabb, mert ott a lézer-elektron kölcsönhatási tag korlátos. Azonban a maghoz közel ez a kölcsönhatási tag rendkívül felerősödik, és a numerikus eljárás egyre pontatlanabbá válik.

Numerikus számításaink elvégzésekor a hossz mértéket alkalmaztuk. A megoldás során numerikusan integráljuk a (4.1) egyenletet, tipikusan a külső mező nélküli Hamilton operátor valamelyik sajátállapotából kiindulva. Az integrálást egy rövid Δt időlépésben hajtjuk végre, a rendszer időfejlődését leíró propagátort ezen kis lépésre az alábbi módon közelítjük:

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{-iH\Delta t} \psi(x, t) + O(\Delta t^3) \quad (4.5)$$

Időfüggő Hamilton-operátor esetén H -t a közbülső $t + \Delta t/2$ időpontban értékeljük ki [16]. Ez a rövid időlépéses propagátor időben másodrendben pontos eredményt ad. Az előbbi formulában szereplő Hamilton operátort tehát hosszmértékben a következőképpen írjuk fel:

$$H = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t + \Delta t/2), \quad V(x, t) = V_0(x) + E(t)x \quad (4.6)$$

itt a statikus és az időben változó kölcsönhatási potenciálokat egy tagban foglaltuk össze.

4.3. Modell potenciálok

Az atomi erők modellezésére $V_0(x)$ helyén modell potenciálokat vagy pseudopotenciálokat szoktak használni [16]. Ebben a dolgozatban csak a modell potenciálokkal foglalkozunk. A modell potenciálokat az egyszerűségük miatt kedvelik: egydimenzióban gyors számításokat eredményeznek és többdimenziós elektron-atom kölcsönhatásokat vizsgálhatóvá teszik.

A leggyakrabban előforduló modell potenciál az erős terek fizikájában az úgynevezett egydimenziós soft-Coulomb potenciál

$$V_C(x) = -\frac{q}{\sqrt{x^2 + a^2}}, \quad (4.7)$$

ahol q az atommag töltése, a egy választható paraméter. Ez a potenciál nem tartalmaz - a

Coulomb potenciállal ellentétben - numerikusan nehezen kezelhető szingularitást. Fontos tulajdonsága, hogy reprodukálja a végtelen hatótávú háromdimenziós Coulomb potenciál legfontosabb jellemvonásait: a végtelen számú kötött állapotból induló Rydberg-sorozat és a kontinuum Coulomb torzítását. Analóg a hidrogén potenciáljának hengerkoordinátás alakja, ahol $V(\rho, z) = -q/\sqrt{\rho^2 + z^2}$, csak a (4.7) összefüggésben z^2 helyett az a^2 paraméter szerepel. A q és a^2 paraméterek megfelelő megválasztásával több különböző atomi rendszer ionizációs potenciálja reprodukálható, amely kvalitatív összehasonlítást enged meg a három dimenzióban kapott ionizációs sebességekkel, nem rezonáns esetben: például ha $q = 1$ és a^2 -et egyenlőnek választjuk hidrogén alapállapotbeli $\langle \rho^2 \rangle = 2$ -vel, akkor megkapjuk a hidrogén ionizációs potenciálját $E_I = 1/2$ -et. Erre a simító paraméterre analitikus hullámfüggvény ismert, amely segítségével a módszer pontossága ellenőrizhető. Természetesen az alapállapotbeli energiák egyezése nem jelenti a gerjesztett állapotok energiáinak helyes leírását [16].

Rövid hatótávú potenciálként szokták használni, az ún. Eckart-típusú [17] modell potenciált

$$V_E(x) = -\frac{u_0}{\cosh^2(\beta x)}, \quad (4.8)$$

ahol u_0 és β választható paraméter. Ez a potenciál $u_0 = 1$ és $\beta = 1$ esetén csak egy kötött állapottal rendelkezik, amelynek energiája egybeesik a hidrogén alapállapot energiájával. A paraméterek változtatásával a kötött állapotok száma növelhető - ez lehetővé teszi, hogy megkülönböztessük a kötött állapot által generált nemlineáris polarizációs választ, a kontinuum hullámcsomag hosszú hatótávú Coulomb potenciál okozta torzításaitól [12].

A következő, általunk is használt potenciál a Dirac-delta modell potenciál

$$V_D(x) = -u_0\delta(x - a), \quad (4.9)$$

ahol u_0 választható paraméter, a a vonzócentrum térbeli koordinátája. Ez a potenciál egyetlen kötött állapottal rendelkezik, amely

$$\psi(x) = \sqrt{u_0 m} e^{-u_0 m |x - a|} \quad (4.10)$$

alakú, a kötött állapot energiája $E = -u_0^2 m/2$ képlettel adható meg [11]. Az $u_0 = 1$, $m = 1$ helyettesítéssel élve visszkapjuk a hidrogén alapállapot energiáját. A Dirac-delta potenciál jelenlétét a Schrödinger-egyenlet véges differencia módszerrel történő megoldása esetén a vonzó centrum helyén a hullámfüggvény félérintőire kirótt kényszerfeltétellel lehet implementálni, például az alábbi egyenlet szerint:

$$\psi(a - \Delta x) + 2(u_0 m \Delta x - 1)\psi(a) + \psi(a + \Delta x) = 0, \quad (4.11)$$

ahol Δx térbeli lépés nagysága [18]. A delta potenciál előnye, hogy analitikusan is jól

kezelhető, a numerikus számolás eredményei összevethetők az analitikus eredményekkel, a (4.10) alapállapot segítségével ellenőrizni lehet a numerikus módszer pontosságát. Továbbá kötött állapota rendelkezik a háromdimenziós Coulomb potenciálnak azzal a tulajdonságával, hogy alapállapotának csúcsa van az origóban. A lézertérrel való kölcsönhatáskor az alagútjelenség mindig fellép (a soft-Coulomb és az Eckart potenciál esetén ez nincs feltétlen így), továbbá a lézertér nem torzítja el a potenciál alakját.

4.4. Crank-Nicolson módszer

A továbbiakban az egydimenziós időfüggő Schrödinger-egyenlet numerikus megoldási módszereit vizsgáljuk fel, egy adott $\psi(x, t_0)$ kezdeti állapot esetén.

A Crank-Nicolson módszer a vizsgált rendszer (rövid időlépéses) propagátorát a Cayley-alakkal [19] közelíti

$$e^{-iH\Delta t} = \frac{1 - iH \cdot \Delta t/2}{1 + iH \cdot \Delta t/2} + O(\Delta t^3). \quad (4.12)$$

Ez a közelítés is időben másodrendben pontos. Fontos tulajdonsága az egzakt propagátorhoz hasonlóan, hogy unitér, azaz megőrzi a normát és feltétel nélkül stabil.

Az időléptetés Crank-Nicolson módszerrel tehát az alábbi

$$\left[1 + iH \frac{\Delta t}{2}\right] \psi(x, t + \Delta t) = \left[1 - iH \frac{\Delta t}{2}\right] \psi(x, t). \quad (4.13)$$

Bevezetve új változót következő időlépésben lévő hullámfüggvény értékeire:

$$y(x, t) = \psi(x, t + \Delta t) + \psi(x, t) \quad (4.14)$$

a probléma a következő alakra egyszerűsödik

$$\left[1 + iH \frac{\Delta t}{2}\right] y(x, t) = 2\psi(x, t). \quad (4.15)$$

Itt a következő egyszerűsítő jelöléssel élünk

$$y(x) = y(x, t), \quad V(x) = V(x, t + \Delta t/2), \quad \psi(x) = \psi(x, t), \quad (4.16)$$

mert csak egy rögzített $t \rightarrow t + \Delta t$ időlépést vizsgálunk.

Most behelyettesítve a (4.13) összefüggésbe a (4.6) Hamilton operátort, a következő eredményt kapjuk

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} y(x) + \left[i \frac{4m}{\Delta t} - 2mV(x)\right] y(x) = i \frac{8m}{\Delta t} \psi(x). \quad (4.17)$$

A parciális deriváltat kifejezve:

$$\frac{\partial^2 y(x)}{\partial x^2} = 2m \left[V(x) - i \frac{2}{\Delta t} \right] y(x) + 2m \left[i \frac{4}{\Delta t} \psi(x) \right] \quad (4.18)$$

Ezen a ponton a szokásos eljárás a másodrendű derivált

$$\frac{\partial^2 y(x)}{\partial x^2} = \frac{y(x + \Delta x) + y(x - \Delta x) - 2y(x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \quad (4.19)$$

centrál differenciával történő közelítése, amely a következő alakot eredményezi

$$y(x + \Delta x) + 2 \left[i \frac{2m\Delta x^2}{\Delta t} - m\Delta x^2 V(x) - 1 \right] y(x) + y(x - \Delta x) = i \frac{8m\Delta x^2}{\Delta t} \psi(x). \quad (4.20)$$

Ez az összefüggés a térváltozó diszkretizálása után, illetve a megfelelő peremfeltételekkel kiegészítve lineáris egyenletrendszert eredményez, amit minden x_j rácspontban meg kell oldani $y(x_j)$ -re. Ez az eljárás a térben harmadrendben pontos, de tovább finomítható térváltozóban ötödrendben pontossá, viszonylag kicsi többletszámolást igényelve a szimulációk során.

4.5. Numerov módszer

A Numerov módszer lényege, hogy a (4.18) egyenlet segítségével meghatározzuk a negyedrendű korrekciót a térváltozó szerinti parciális derivált (4.19) centrál differencia közelítésében [20].

A parciális derivált kifejezhető mint

$$\frac{\partial^2 y(x)}{\partial x^2} = 2mY(x), \quad (4.21)$$

ahol

$$Y(x) = \left[V(x) - i \frac{2}{\Delta t} \right] y(x) + i \left[\frac{4}{\Delta t} \psi(x) \right] \quad (4.22)$$

jelöléssel élünk. Most a (4.21) Taylor-kifejtését használva

$$\frac{y(x + \Delta x) + y(x - \Delta x) - 2y(x)}{\Delta x^2} = y^{(2)}(x) + \frac{1}{12} y^{(4)}(x) \Delta x^2 + O(\Delta x^4), \quad (4.23)$$

alakot kapjuk, ahol $y^{(2)}(x)$, $y^{(4)}(x)$ a térváltozó szerinti másod-, illetve negyedrendű derivált. Amennyiben csak az $y^{(2)}(x)$ tagot vesszük figyelembe, akkor az eredmény a jól ismert Crank-Nicolson eljárás lesz.

A $y^{(4)}(x)$ korrekciós tagra kell összefüggést találnunk, amely (4.21) alapján egyszerűen adódik: $y^{(4)}(x) = 2m \cdot Y^{(2)}(x)$. Újra alkalmazva a (4.19) centrális differencia sémát, ezúttal $Y(x)$ -re, és az eredményt beírva a (4.23) egyenletbe, a következő alak adódik:

$$\frac{y(x + \Delta x) + y(x - \Delta x) - 2y(x)}{\Delta x^2} = 2m \frac{Y(x + \Delta x) + Y(x - \Delta x) + 10Y(x)}{12} + O(\Delta x^4) \quad (4.24)$$

Következő lépésként beírjuk ebbe a formulába (4.22) jelölést és mindkét oldalt beszorozzuk Δx^2 -el. Ekkor a hibátág Δx^6 -nal lesz arányos, vagyis a módosított eljárás ötödrendben pontos lesz. Elvégezve a műveleteket belátható, hogy továbbra is tridiagonális alakot kapunk:

$$Ay(x + \Delta x) + By(x) + Cy(x - \Delta x) = D \quad (4.25)$$

ahol

$$A = [12 - 2m\Delta x^2 V(x + \Delta x)] + i \left[4m \frac{\Delta x^2}{\Delta t^2} \right] \quad (4.26)$$

$$B = [-24 - 20m\Delta x^2 V(x)] + i \left[40m \frac{\Delta x^2}{\Delta t^2} \right] \quad (4.27)$$

$$C = [12 - 2m\Delta x^2 V(x - \Delta x)] + i \left[4m \frac{\Delta x^2}{\Delta t^2} \right] \quad (4.28)$$

$$D = i \frac{8m\Delta x^2}{\Delta t} [10\psi(x) + \psi(x + \Delta x) + \psi(x - \Delta x)] \quad (4.29)$$

együtthatók szerepelnek.

Amennyiben dobozba zárt részecskének megfelelő peremfeltételt választunk, és az x térváltozót diszkrétizáljuk mint $x_j = x_0 + j\Delta x$ (itt $j = 0 \dots J-1$), akkor a hullámfüggvény a vizsgált intervallumon kívül eltűnik: $\psi(x < x_0, t) = \psi(x > x_{J-1}) = 0$. Eredmény: tridiagonális lineáris egyenletrendszer, J egyenlet, J ismeretlennel; amelyet minden $y(x_j)$ -re meg kell oldanunk. Látható, hogy a (4.26) - (4.29) együtthatókból keletkező mátrix diagonálisan domináns, ezért a lineáris egyenletrendszer megbízhatóan megoldható mind Gauss-eliminációs, mind visszahelyettesítésen alapuló módszerekkel. A $\psi(x_j, t + \Delta t)$ -beli hullámfüggvény értékeit pedig (4.14) alapján rekonstruálhatjuk.

4.6. Számítógépes implementáció

Készítettünk egy számítógépes programot, amely a (4.1) - (4.3) által meghatározott időfüggő Schrödinger-egyenlet diszkrétizált változatát oldja meg. A megoldási módszer alapja a Crank-Nicolson véges differencia-módszer, kiegészítve az előző fejezetben tárgyalt Numerov-módszerrel. Az egyenletet csak egy véges zárt $[-x_{\max}, x_{\max}]$ térintervallumon és egy véges $[0, t_{\max}]$ időtartamra oldottuk meg, Δt időlépésként haladva előre. A térintervallum szélén a dobozba zárt részecskének megfelelő peremfeltétellel éltünk, ez a (4.25)

alakú, (4.26) - (4.29) együtthatók által meghatározott tridiagonális lineáris egyenletrendszer megoldását jelenti minden időlépésben. Ezen egyenletrendszert a visszahelyettesítéssel alapuló módszerrel oldottuk meg [21, 18].

A kódot C++ nyelven készítettük el, a bináris futtatható fájlokat nyílt forráskódú G++ fordítóval hoztuk létre. Előző munkánk során [18] C programnyelvet használtunk, azonban néhány rendkívül hasznos nyelvi elem indokolta a váltást - képesek voltunk a beépített adattípusokhoz hasonló szintaxisú és hatékonyságú saját típusokat létrehozni. Ez a tény hibaelhárítás és tesztelés során könnyen kiszűrhetővé tette a legalattomosabb programozási hibákat, mint a memóriaszivárgás és tömbtúlindekselés. Az egész program általunk készített keretrendszerre épül fel, semmilyen harmadik féltől származó kódtól nem függ, csak a C++ könyvtártól az STL-től (Standard Template Library) - mindkettő a C++ nyelv része. Saját keretrendszer alatt értendő pl. saját adattömb típusok, ezekhez kapcsolódó bemenet/kimenet kezelés, matematikai függvények és egy bináris fájlformátum.

A számításokhoz a valós számokat IEEE szabvány szerinti 64 bites lebegőpontos számokkal (floating point) ábrázoltuk, ezekkel kb. 15 tizedesjegy pontossággal és $10^{\pm 308}$ nagyságrendben lehet számításokat végezni [19]. A komplex számok ábrázolására a beépített `complex<>` osztállyablont használtuk (ez két valós számot jelent). A programunkban a potenciált $V_{kh,x}(x) \cdot V_{kh,t}(t) + V_0(x)$ alakúnak tételezzük fel, ahol $V_0(x)$ atomi modell potenciál. Dirac-delta modell potenciál esetén $V_0(x) = 0$ és egy kapcsoló biztosítja a Numerov-módszerrel felírt tridiagonális egyenletrendszer módosítását a (4.11) és (4.14) összefüggések alapján. Ennek lépésnek több hátulütője van, pl. ebben a rácspontban a pontosság csak elsőrendű lesz és a diszkretizált delta potenciál alapállapota különbözni fog a (4.10) egyenlettel megadott analitikustól. Ennek egyik megnyilvánulása, hogy a (4.10) alakú analitikus kezdeti állapotban a (4.11) diszkretizálási feltétel kis mértékű sérülése. Számításaink során a Dirac-delta alapállapotát mindig korrigáltuk úgy, hogy (4.11) feltétel teljesüljön.

A program kimenete nem maga a szimulált $\Psi(x, t)$ diszkrét hullámfüggvény, mert - sajnálatos módon - az általunk használt felbontások esetén (pl. téroosztás: 200001, időlépés: 600001, akkor az eredmény ≈ 1788 GiB) azt sem a memóriában, sem a HDD-n nem tudtuk eltárolni, sem utána beolvasatni. Ezért a különböző vizsgált mennyiségeket a Crank-Nicolson eljárással szinkronban számoltuk ki és csak egy (lineáris interpolációval kapott) alacsonyabb felbontású változatát írtuk ki a hullámfüggvénynek. A program által szolgáltatott eredményeket Wolfram Mathematica 8-al dolgoztuk fel.

4.7. Tesztelés

Három fő teszt sorozatot végeztünk el a módszer pontosságára: időfüggetlen potenciál; Dirac-delta potenciál; időfüggő potenciál. A pontosság jellemzésére a következő mennyiségeket vezettük be:

$$\Delta P_{\max} = \max P(t) - \min P(t), \quad (4.30)$$

ahol $P(t) = \int_{-x_{\max}}^{x_{\max}} |\Psi(x, t)|^2 dx$ összvalószínűség, numerikusan a Simpson-formulával [19] közelítve. Ez az összvalószínűség maximális ingadozásának nevezhető. Analitikus esetben $\Delta P_{\max} = 0$, mert az időfüggő Schrödinger-egyenlet megőrzi a $P(t)$ valószínűséget. A második mennyiség az stacionárius állapot abszolút értékének változását jellemzi:

$$\Delta |\Psi|_{t_{\max}}^2 = \max [|\Psi(x, 0)|^2 - |\Psi(x, t_{\max})|^2] - \min [|\Psi(x, 0)|^2 - |\Psi(x, t_{\max})|^2], \quad (4.31)$$

analitikus esetben csak Ψ fázisa változik, azaz minden $t_{\max}$ paraméterre $\Delta |\Psi|_{t_{\max}}^2 = 0$.

Numerov-módszer pontosságát a soft-Coulomb potenciál alapállapotával hasonlítottuk össze (4.2 táblázat). Ezt összevetve Dirac-delta potenciál diszkretizált változatának (korrigált) alapállapotbeli viselkedésével (4.1 táblázat) látható, hogy az utóbbi lényegesen pontatlanabb. A numerikus hibák azonban az idő előrehaladtával nem nőnek korlátlanul, hanem a számítás elején jelennek meg [18]. Ez arra vezethető vissza, hogy a diszkretizált delta potenciál alapállapota (és alapállapoti energiája is) kissé eltér az analitikusétól.

Δx [a.u.]	0,1	0,05	0,01	0,005	0,001
$\Delta P_{\max}$	$6,80 \cdot 10^{-3}$	$1,59 \cdot 10^{-3}$	$5,98 \cdot 10^{-5}$	$1,47 \cdot 10^{-5}$	$5,81 \cdot 10^{-7}$
$\Delta \Psi _{t_{\max}}^2$	$6,38 \cdot 10^{-2}$	$3,06 \cdot 10^{-2}$	$5,96 \cdot 10^{-3}$	$2,94 \cdot 10^{-3}$	$5,83 \cdot 10^{-4}$
$\omega/\omega_{\text{an}}$	1,11	1.05	1.01	1.005	1.001

4.1. táblázat. Delta-potenciál tesztelése stacionárius állapotban. Mivel a delta potenciál diszkretizált, ezért mind az összvalószínűség maximális megváltozása ($\Delta P_{\max}$), mind a hullámfüggvény abszolútértékének megváltozása ($\Delta |\Psi|_{t=100}^2$), mind a szimulált és analitikus sajátfrekvencia becsült aránya ($\omega/\omega_{\text{an}}$) függ a térbeli Δx lépésköztől. Futtatási paraméterek: $u_0 = 1$, $m = 1$, $t_{\max} = 100$, $x_{\max} = 50$. Összehasonlítva a Crank-Nicolson sémával kapott eredményekkel, a Numerov módszer pontosabbnak adódik [18].

Δx [a.u.]	0,1	0,05	0,01	0,005	0,001
$\Delta P_{\max}$	$5,34 \cdot 10^{-14}$	$3,50 \cdot 10^{-12}$	$3,16 \cdot 10^{-12}$	$7,03 \cdot 10^{-13}$	$3,49 \cdot 10^{-12}$
$\Delta \Psi _{t=100}^2$	$3,14 \cdot 10^{-7}$	$1,95 \cdot 10^{-8}$	$3,02 \cdot 10^{-11}$	$2,03 \cdot 10^{-12}$	$1,05 \cdot 10^{-12}$

4.2. táblázat. A $V_0(x) = 1/\sqrt{x^2 + 2}$ soft-Coulomb potenciál tesztelése alapállapotban az 4.1 táblázattal azonos futtatási paraméterekkel. A számítás során a 64 bites lebegőpontos ábrázolás pontossága kb. 15 tizedesjegy: az eredmények alapján a Numerov-módszer térképésben rendkívül pontos.

	$0 < F \leq 0,3$	$0,3 < F \leq 0,5$	$0,5 < F \leq 0,7$	$0,7 < F \leq 1,0$
Δx [a.u.]	0,01	0,01	0,005	0,005
Δt [a.u.]	0,001	0,0005	0,0002	0,0001
$t_{\text{futás}}$ [h]	3	6	12	24

4.3. táblázat. Szabad elektron Volkov-állapotainak numerikus szimulációja $V(x, t) = x \cdot F \cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right)$ alakú külső potenciál esetén. Az analitikus és numerikus módon számolt hullámfüggvények abszolútértékeinek 10^{-4} -es egyezéséhez szükséges legnagyobb Δx , Δt , a fejlécben jelzett F paraméter-tartomány esetén. Az elektromos mező periódusideje rögzített, $T = 110,35$ a.u.. Szemléltetésként feltüntettük a program futási idejét 2,4 GHz órajelű PC esetén, ez a $t_{\text{futás}}$ [18].

Az időfüggő potenciálú Numerov-módszer vonatkozó tesztelését az 3.2 pontban tárgyalt Volkov-megoldásokkal hasonlítottuk össze - hossz mértékben (4.3 táblázat). A tesztek során bebizonyosodott, hogy a kölcsönhatási tag meredek növekedése miatt az eredmény rendkívül pontatlanná válhat az időbeli diszkretizációból adódó, numerikus hibák erősödése miatt. Tesztsorozatunkban meghatároztuk az adott $F \cdot \sin(\omega \cdot t)$ kölcsönhatási taghoz tartozó 10^{-4} abszolút pontosságot garantáló Δt időlépést [18]. A későbbi szimulációink során az időlépést mindig a 4.3 táblázattal összhangban állítottuk be.

5. A numerikus módszeren alapuló eredmények

Az előzőekben ismertetett numerikus módszert és programot egy nagy intenzitású, lineárisan polarizált, 3-ciklusú, közeli infravörös központi hullámhosszú lézerimpulzussal kölcsönható atomi elektron mozgásának szimulációjára alkalmaztuk [22, 23].

5.1. Modell

Dipólus közelítést alkalmazunk és egyetlen aktív elektront tekintünk, valamint hosszmerőket használunk az atom és az elektromágneses tér kölcsönhatásának leírásában. Mivel a lézerimpulzus lineárisan polarizált, a folyamatot egy térdimenzióban vizsgáltuk, amely az elektromos mező iránya. Az iontörzs és az elektron kölcsönhatását Dirac-delta potenciállal közelítjük.

A Hamilton-operátor az elektron és az ion koordinátákkal kifejezve (amelyeket rendre az e és c indexek jelölnek) az alábbi alakot ölti

$$H = \frac{P_e^2}{2m_e} + \frac{P_c^2}{2m_c} - u_0\delta(X_e - X_c) + eE(t)(X_e - X_c), \quad (5.1)$$

itt $u_0 > 0$ Dirac-delta potenciál erőssége, $e(> 0)$ az elemi töltés, $E(t)$ pedig a lézerimpulzus elektromos térerőssége. A kéttest-problémák esetén szokásos tömegközépponti és relatív koordináták:

$$X_0 = \frac{m_e}{M}X_e + \frac{m_c}{M}X_c, \quad P_0 = P_e + P_c, \quad (5.2)$$

$$X = X_e - X_c, \quad P = \frac{m_c}{M}P_e - \frac{m_e}{M}P_c, \quad (5.3)$$

ahol $M = m_e + m_c$ illetve $\mu = m_em_c/M$ a rendszer össztömege, illetve redukált tömege. Ezek segítségével a Hamilton-operátor az alábbi alakba írható:

$$H = \frac{P_0^2}{2M} + \frac{P^2}{2\mu} - u_0\delta(X) + eE(t)X \quad (5.4)$$

ez pedig már felbontható csak a tömegközépponti és csak a relatív koordinátától függő tagok összegére, ami garantálja a Schrödinger-egyenlet szeparálhatóságát ezen koordináták szerint.

A tömegközépponti mozgás egyszerűen a szabad részecske kvantummechanikája, ami általában analitikusan megoldható (a kezdeti állapot konkrét alakjától függően). A relatív mozgás Schrödinger-egyenletére nincs ismert analitikus megoldás, ezért ezt az előző fejezetben leírt numerikus módszerrel oldottuk meg.

A modell paramétereit a következőképpen állítottuk be: a Dirac-delta potenciál erősségének értéke $u_0 = \hbar\sqrt{2|E_0|/\mu}$, ami azt biztosítja, hogy az egyetlen kötött állapot energiája megfelel a hidrogénatom alapállapot energiájának (E_0). A lézerimpulzus elekt-

romos terét egy 3-ciklusú, $\sin^2$ burkolójú függvénnyel közelítjük, a hordozó periódusidejét 100 atomi egységnek választottuk (ami kb. 726 nm központi hullámhosszat jelent):

$$E(t) = F \cdot \sin^2(2\pi t/600) \cdot \cos(2\pi t/100 + \text{CEP}). \quad (5.5)$$

Ez az impulzus a következő kezdeti állapotból indítja a rendszert: a relatív mozgás a Dirac-delta potenciál kötött állapotának hullámfüggvénye, a tömegközépponti mozgás pedig egy Gauss-függvény, aminek szélességét a hidrogén atom méretéhez illesztettük.

5.2. Kvantumos dinamika a fázistéren: Wigner függvény

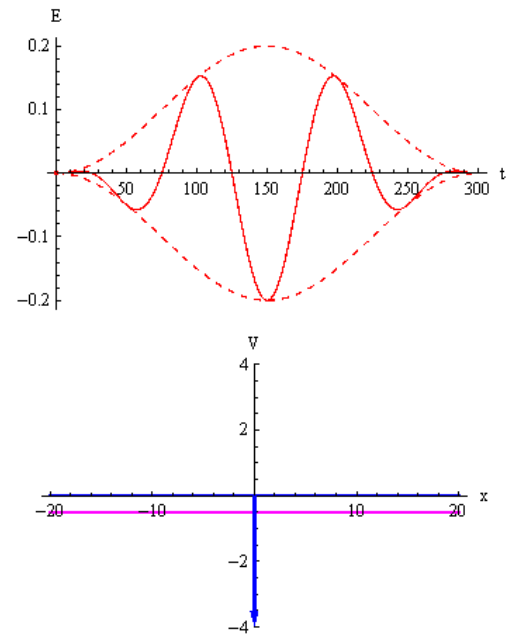
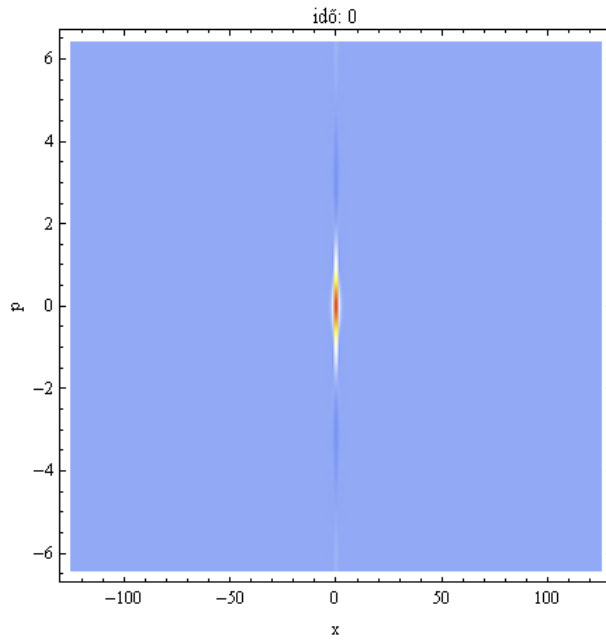
A relatív mozgás numerikus szimulációjának eredményét a klasszikus fázistéren értelmezett Wigner-függvény segítségével szemléltetjük [24].

A Wigner függvény a kvantumrendszer állapotának pontos reprezentációja a klasszikus fázistéren, melyet a hullámfüggvényből számíthatunk ki. Egydimenziós tiszta kvantum-állapot esetén a definíciója az alábbi:

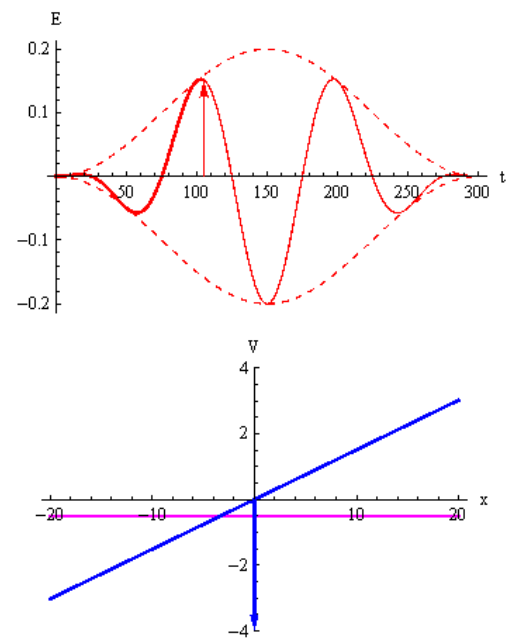
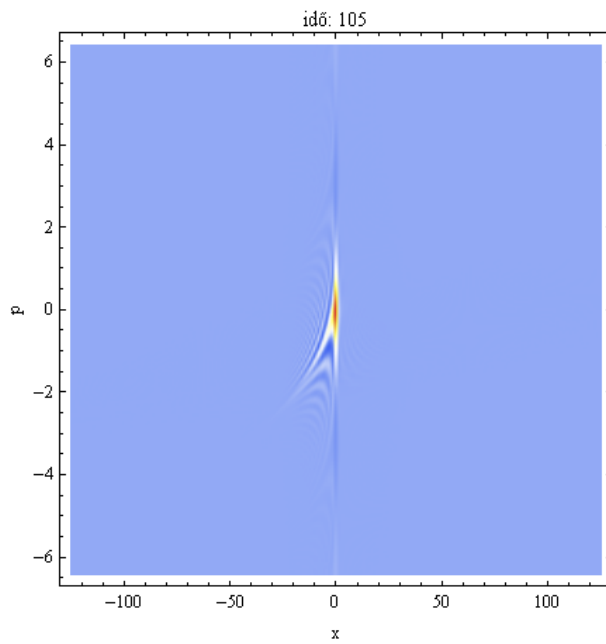
$$W(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(q-x)\psi(q+x) \exp(2ipx/\hbar) dx. \quad (5.6)$$

A Wigner függvényt kvázivalószínűségi sűrűségfüggvények is szokás nevezni, mert szerepe hasonló a klasszikus mechanikában használatos valószínűségi sűrűségfüggvényekhez: egy fizikai mennyiség kvantummechanikai várható értéke a Wigner függvénnyel képzett szorzatának a teljes fázistérre vett integráljával kiszámítható, azonban a Wigner függvény általában negatív függvényértékeket is felvehet, ami a szigorú valószínűségi értelmezést nem teszi lehetővé. A Wigner függvény sok kvantumelméleti ill. kvantumoptikai probléma esetén hasznos eszköze a kvantumtulajdonságok feltárásának [25, 26, 12].

Az 5.1 és 5.2 ábra a relatív mozgás Wigner függvényét mutatja a folyamat bizonyos időpillanataiban, valamint az elektromos térerősség illetve a teljes potenciál értékét. Az 5.1(a) ábra a kezdeti állapotot szemlélteti, ami a Dirac-delta potenciál kötött állapota. Az 5.1(b) ábra az első hullámcsomagot mutatja amint balra kiszabadul a lézertér hatására, amely az 5.2(a) ábra időpillanatában éppen újraszóródik az ionon és interferál a jobbra induló fő hullámcsomaggal. Mindkét hullámcsomag visszatér újra az ionhoz és újraszóródik, amint az 5.2(b) ábrán látható.

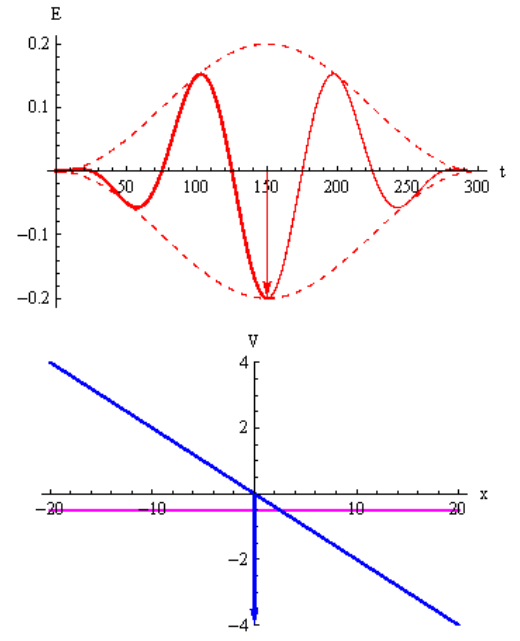
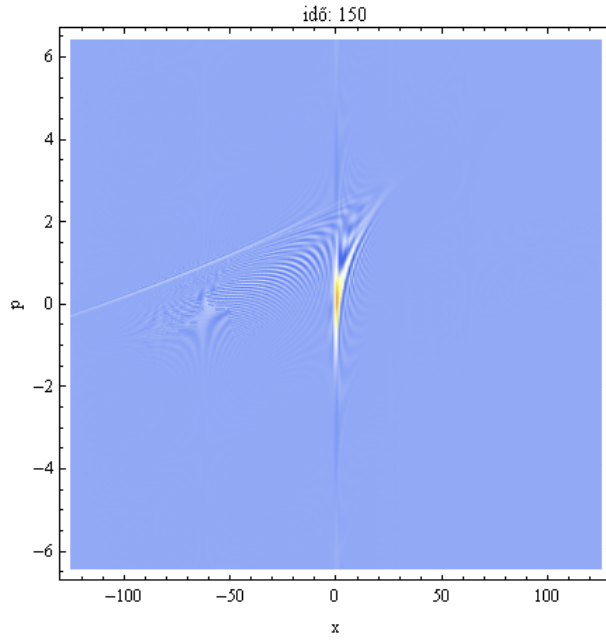


(a)

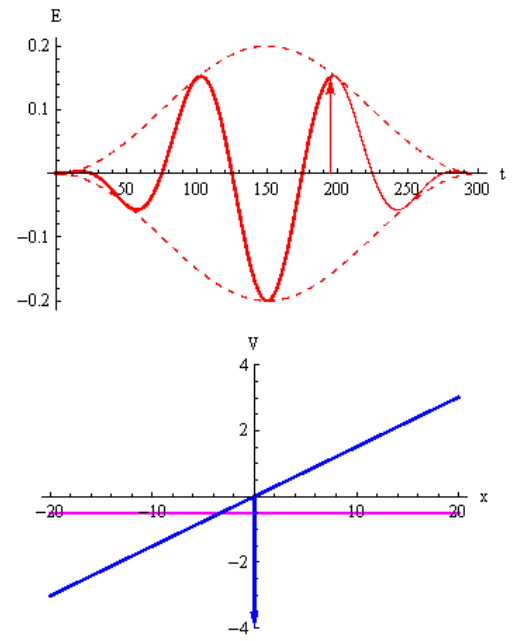
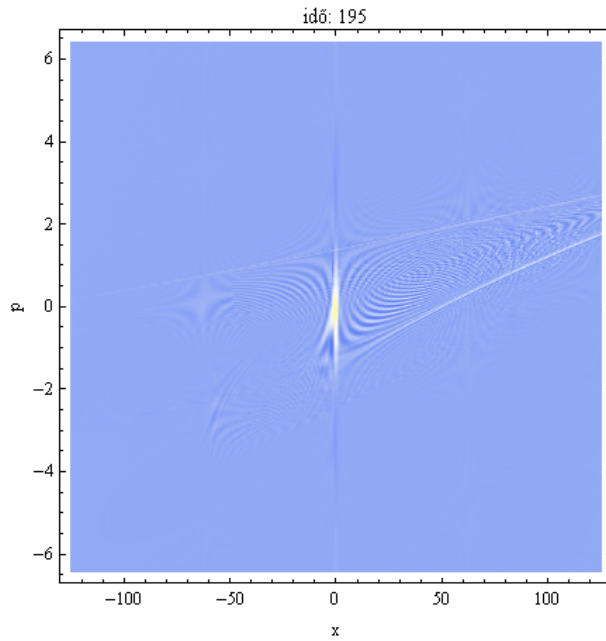


(b)

5.1. ábra. A relatív mozgás Wigner függvényének sűrűség-ábrái az 1. és 2. kiragadott időpillanatban, melyeket az ábrák jelölnek atomi egységekben, mellettük a elektromos tér pillanatnyi értéke a lézerimpulzusban, valamint a teljes potenciál aktuális ábrája. A sötétkéktől világos kékig terjedő színárnyalatok negatív függvényértékeket jelölnek, a világos kéktől fehérén és sárgán át pirosig terjedő színek növekvő pozitív függvényértékeket jelölnek.



(a)



(b)

5.2. ábra. A relatív mozgás Wigner függvényének sűrűség-ábrái a 3. és 4. kiragadott időpillanatban, melyeket az ábrák jelölnek atomi egységekben, mellettük a elektromos tér pillanatnyi értéke a lézerimpulzusban, valamint a teljes potenciál aktuális ábrája. A sötétkéktől világos kékig terjedő színárnyalatok negatív függvényértékeket jelölnek, a világos kéktől fehérén és sárgán át pirosig terjedő színek növekvő pozitív függvényértékeket jelölnek.

5.3. Dipólusmomentum időfüggése, magas harmonikusok keltése

A szimulációs eredményeink alapján könnyen előállítható a dipólusmomentum az idő függvényében, az elektron által kisugárzott elektromágneses mező forrása pedig ennek a második időderiváltja.

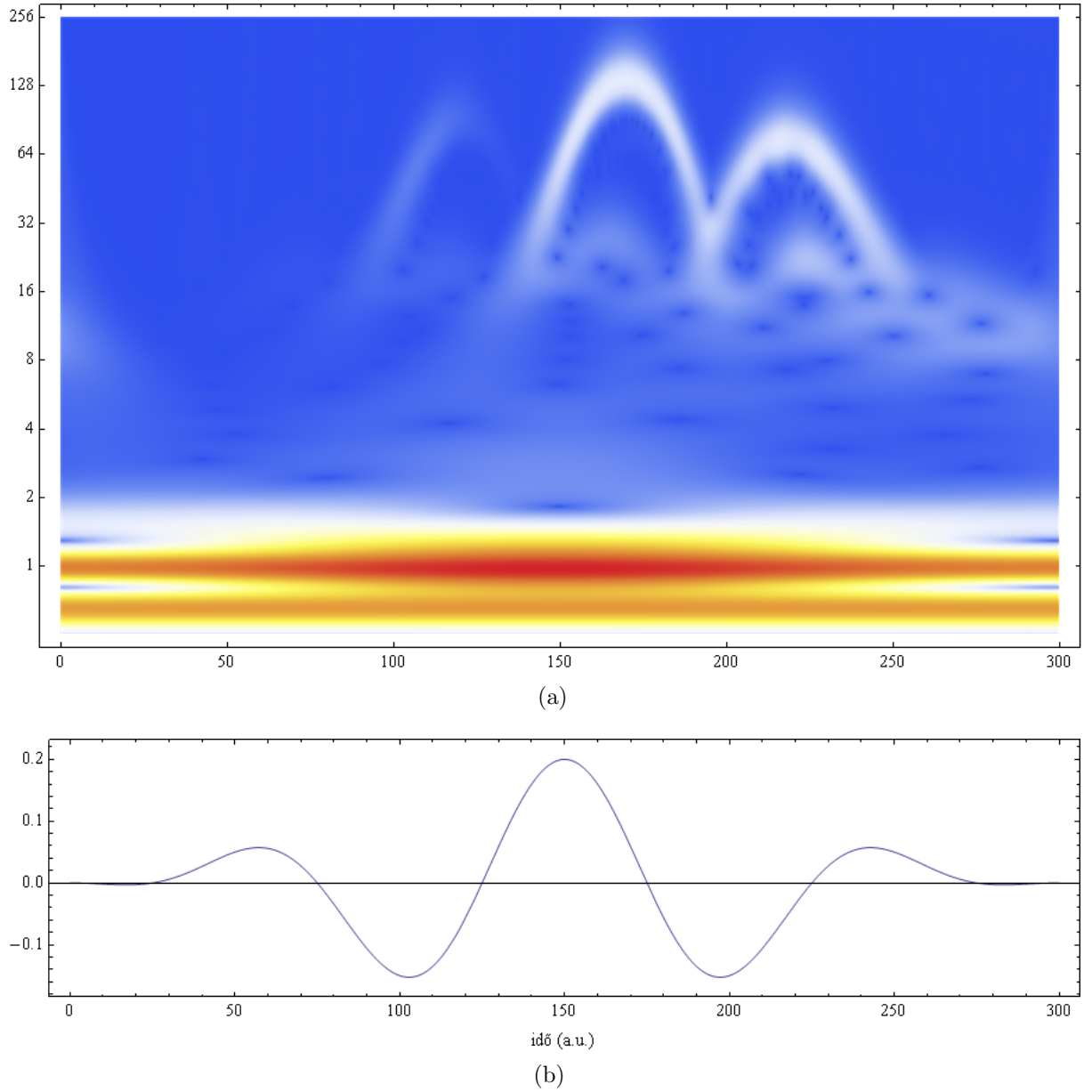
Mint azt már a 3.1 pontban ismertettük, numerikus pontosság szempontjából az a kedvezőbb, ha a második időderiváltat az Ehrenfest tételek alkalmazásával számítjuk ki. Modellünkben a Dirac-delta potenciál sajátos matematikai tulajdonságai miatt az atomi potenciálból eredő tag a részecskesűrűség origónál számított félérítőinek számtani közepével arányos, amit a program nagy időfelbontással és pontosan tud számítani.

A magas harmonikusok szokásos elemzésére a Fourier spektrum használatos, ez azonban nem nyújt információt a spektrális komponensek időbeli sajátosságairól. Tehát ha pl. arra vagyunk kíváncsiak, hogy az újraszóródási folyamat mely időszakában keletkeznek bizonyos magas harmonikusok, akkor hasznosabbnak bizonyul az ún. wavelet analízist alkalmazni. A wavelet analízis által adott eredmények természetesen függenek a konkrét wavelet választástól: mi az ún. Gabor-waveletet használtuk, mert ez egy Gauss-burkolójú hamonikus függvény, ami segít az eredmények értelmezésében. A Gabor-wavelet képlete:

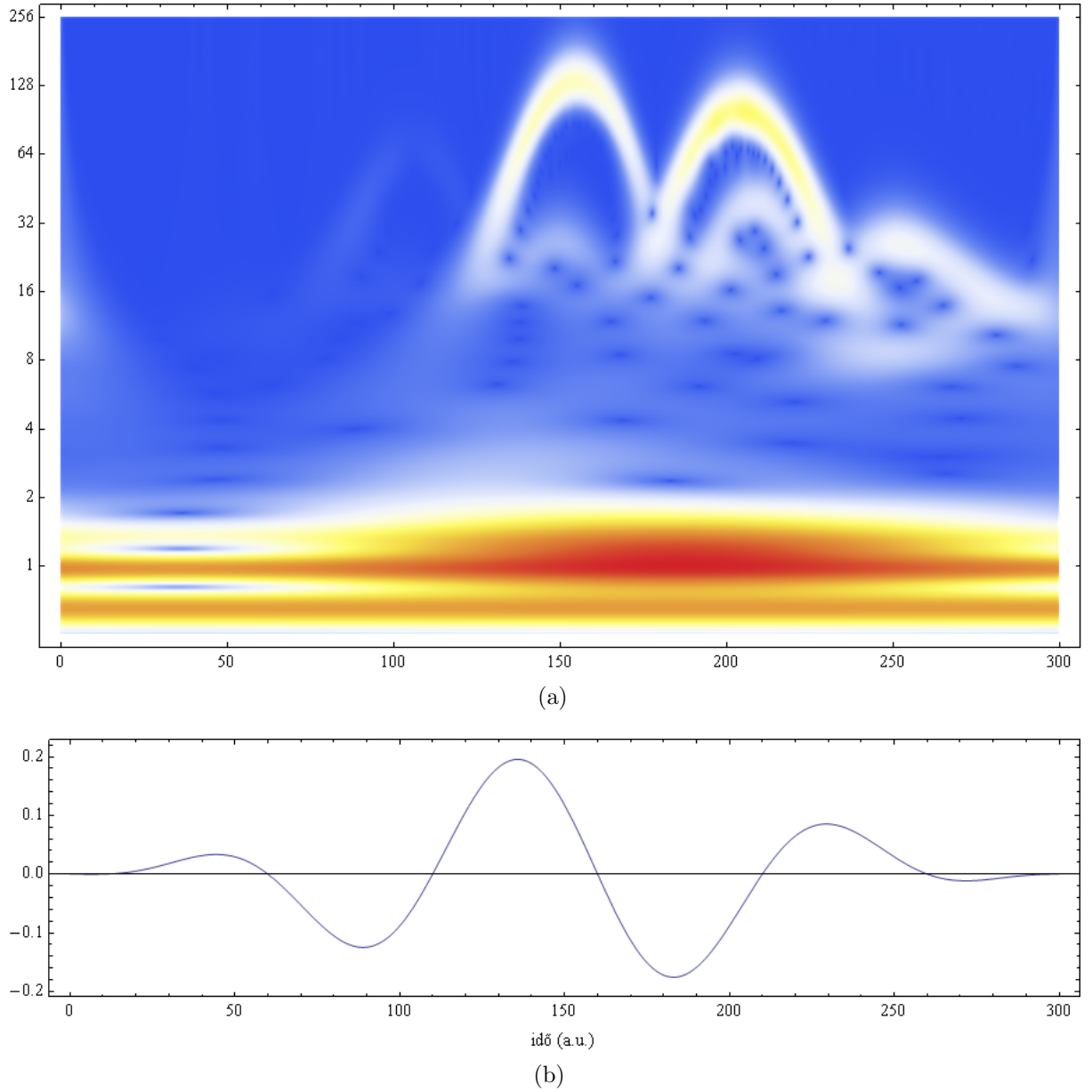
$$w(s, \tau) = \frac{1}{\sqrt{s}} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} a(t) \exp \left[-i2\pi \frac{t - \tau}{s} \right] \exp \left[- \left(\frac{t - \tau}{s} \right)^2 / 2 \right] dt,$$

ahol a τ paraméter az időbeli eltolást jellemzi, az s skálaparaméter a frekvencia reciproka és $a(t)$ a dipólus gyorsulás.

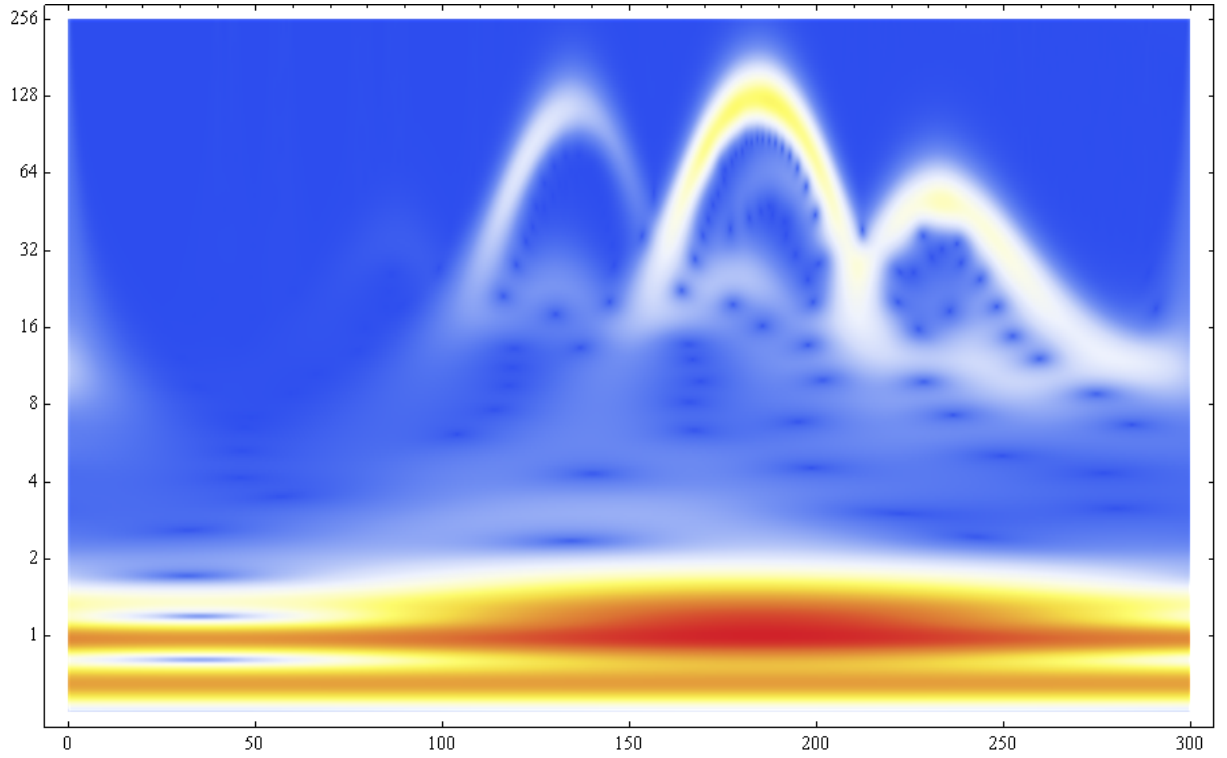
Az 5.3 - 5.5 ábrák a wavelet transzformáció eredményét mutatják a vivő-burkoló fázis (CEP) 3 különböző értéke esetén, a gerjesztő lézerimpulzussal kiegészítve. A vízszintes tengelyen az időt ábrázoljuk atomi egységekben, a függőleges tengely a gerjesztő 3-ciklusú lézerimpulzus 0.01 a.u. értékű vivőfrekvenciája felharmonikusainak indexét mutatja logaritmikus skálán. A színskála a wavelet súlyának abszolútértéknégyzetét mutatja a dipólgyorsulás időfüggésében, ami a kéktől a fehéren és sárgán át a maximális vörösre növekszik. Mint látható, természetesen az alaphfrekvencia súlya a legnagyobb, időben főleg a gerjesztő impulzus harmadik negyedében. A felharmonikusok emissziójának azonban érdekes, jól látható időbeli struktúrája van, ami erősen függ a vivő-burkoló fázis értékétől.



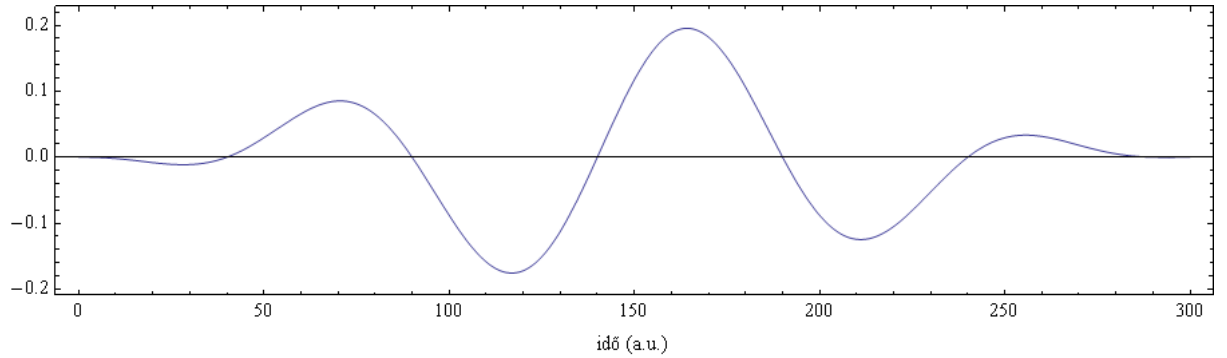
5.3. ábra. Wavelet analízis eredménye (5.5) alakú külső elektromos térerősség és $F = 0.2$, $CEP = 0$ paraméterek esetén. A vízszintes tengelyen az időt ábrázoltuk atomi egységekben, a függőleges tengely a gerjesztő lézerimpulzus vivőfrekvenciája felharmonikusainak indexét mutatja logaritmikus skálán, ahol 1-es index az alapharmonikust jelöli. A színskála a wavelet súlyának abszolútértékénegyzetét mutatja szintén logaritmikus skálán a dipól-gyorsulás időfüggésében: számértéke mélykék színnél 0, amely fehéren és sárgán át a vörösig növekszik, maximális értéke 1. A (b) ábrán a szimuláció során alkalmazott gerjesztő lézerimpulzus időbeli alakja látható.



5.4. ábra. Wavelet analízis eredménye (5.5) alakú külső elektromos térerősség és $F = 0.2$, $CEP = 0.3\pi$ paraméterek esetén. A vízszintes tengelyen az időt ábrázoltuk atomi egységekben, a függőleges tengely a gerjesztő lézerimpulzus vivőfrekvenciája felharmonikusainak indexét mutatja logaritmikus skálán, ahol 1-es index az alapharmonikust jelöli. A színskála a wavelet súlyának abszolútértéknégyzetét mutatja szintén logaritmikus skálán a dipól-gyorsulás időfüggésében: számértéke mélykék színnél 0, amely fehéren és sárgán át a vörösig növekszik, maximális értéke 1. A (b) ábrán a szimuláció során alkalmazott gerjesztő lézerimpulzus időbeli alakja látható.



(a)



(b)

5.5. ábra. Wavelet analízis eredménye (5.5) alakú külső elektromos térerősség és $F = 0.2$, $CEP = -0.3\pi$ paraméterek esetén. A vízszintes tengelyen az időt ábrázoltuk atomi egységekben, a függőleges tengely a gerjesztő lézerimpulzus vivőfrekvenciája felharmonikusainak indexét mutatja logaritmikus skálán, ahol 1-es index az alapharmonikust jelöli. A színskála a wavelet súlyának abszolútértéknégyzetét mutatja szintén logaritmikus skálán a dipól-gyorsulás időfüggésében: számértéke mélykék színnél 0, amely fehéren és sárgán át a vörösig növekszik, maximális értéke 1. A (b) ábrán a szimuláció során alkalmazott gerjesztő lézerimpulzus időbeli alakja látható.

5.4. Kvantumos összefonódottság az elektron és az ion mozgása között

Modellünk szerint a rendszer kvantumállapota a tömegközépponti mozgást és relatív mozgást leíró hullámfüggvények szorzata. Ugyanez a kvantumállapot azonban nem bontható szorzat alakra a elektron illetve ion koordináták hullámfüggvényei szerint, ami azt jelenti, hogy az elektron és az ion kvantumállapota összefonódott [27]. Az ilyen összefonódott kvantumállapotok kétrészecske hullámfüggvényei mindig előállíthatóak az alábbi, ún. Schmidt-felbontás szerint:

$$\Psi(x_e, x_c, t) = \sum_k \sqrt{p_k(t)} \phi_k(x_e, t) \psi_k(x_c, t). \quad (5.7)$$

Itt a $p_k(t)$ valós együtthatók az alábbi egyrészecske-sűrűségmátrixok sajátértékei:

$$\varrho_e(x'_e, x_e, t) = \int \Psi^*(x'_e, x_c, t) \Psi(x_e, x_c, t) dx_c, \quad (5.8)$$

$$\varrho_c(x'_c, x_c, t) = \int \Psi^*(x_e, x'_c, t) \Psi(x_e, x_c, t) dx_e, \quad (5.9)$$

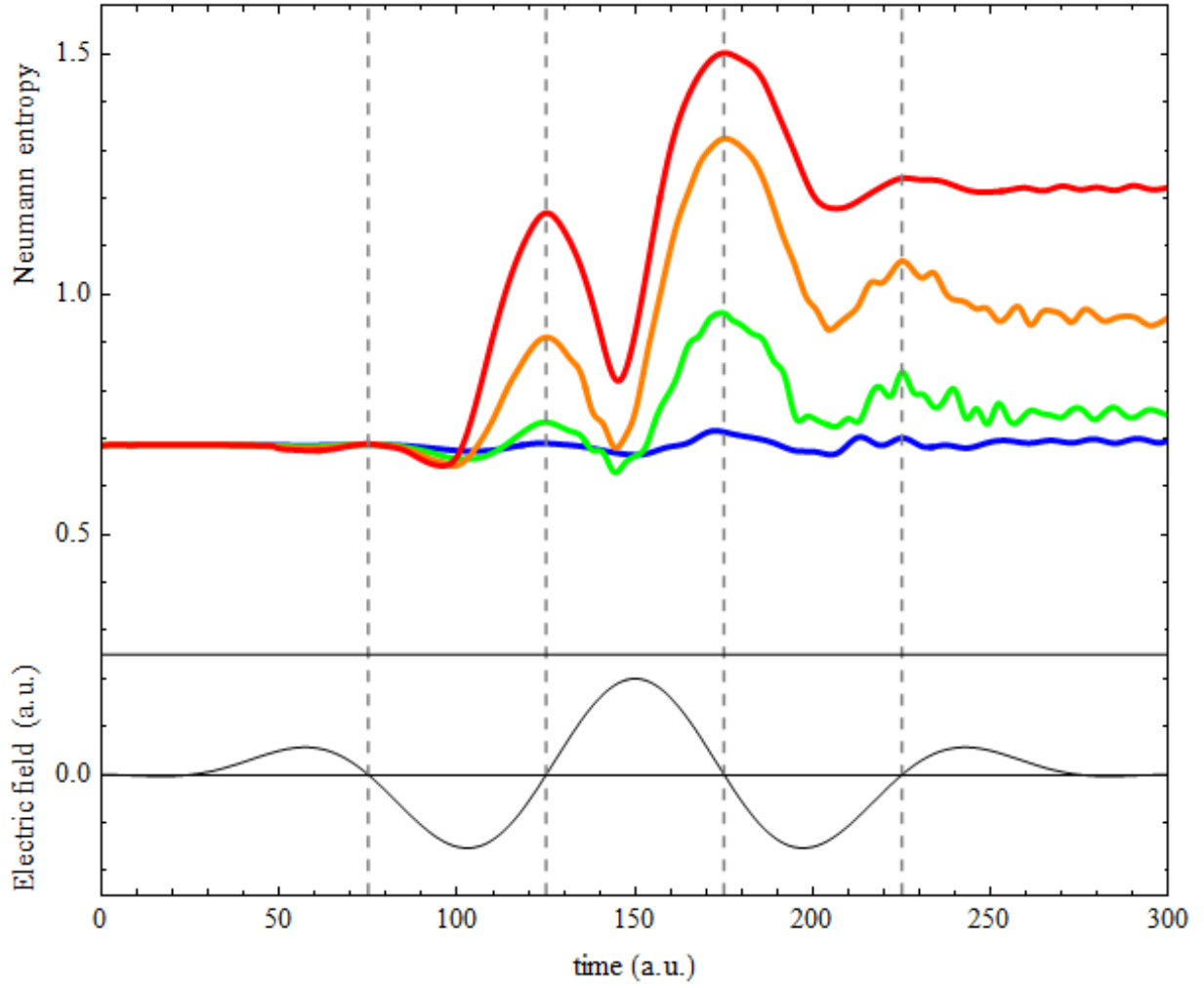
míg $\phi_k(x_e)$ és $\psi_k(x_c)$ rendre a ϱ_e és ϱ_c négyzetesen integrálható sajátfüggvényei. A p_k együtthatók nemnegatívak, diszkrét, összegük 1. Segítségükkel könnyen kiszámíthatjuk a Neumann-entrópiát, ami a kvantumos összefonódottság egyik leggyakrabban alkalmazott mértéke:

$$S_N(t) = -\text{Tr} [\hat{\varrho}_e(t) \ln \hat{\varrho}_e(t)] = -\sum_k p_k(t) \ln p_k(t). \quad (5.10)$$

Egy másik, szintén elterjedten alkalmazott összefonódottsági mérték a lineáris entrópia, ami a kvantumállapot sűrűségmátrixa átlós összegének a tiszta állapotot jelentő 1-től való eltérését méri:

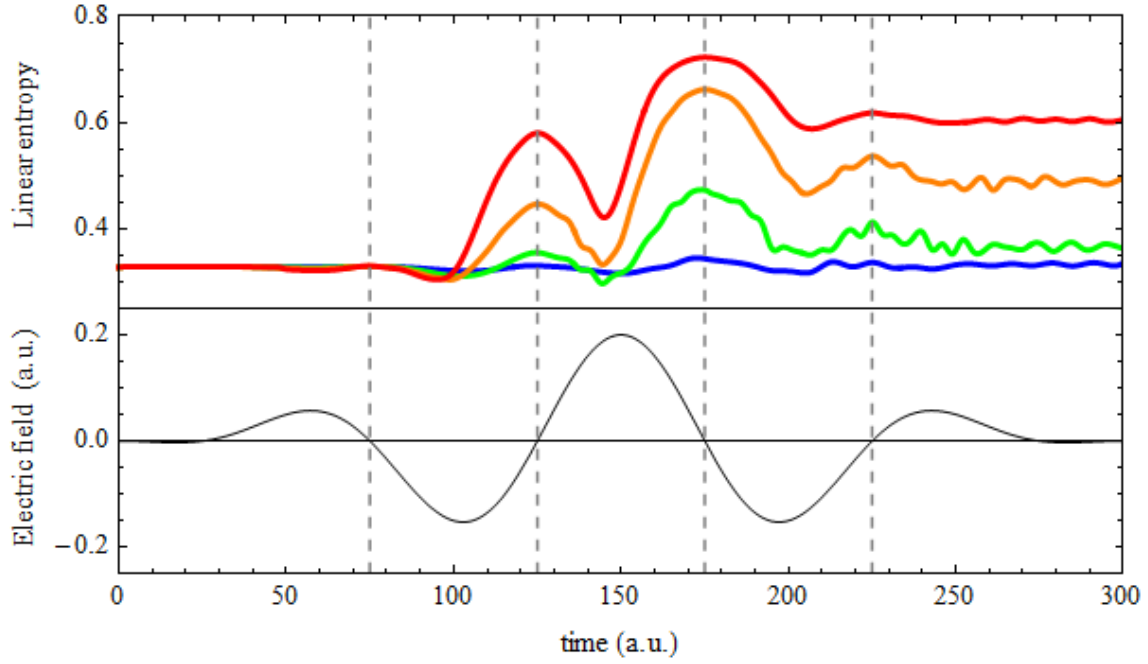
$$S_L(t) = 1 - \text{Tr} [\hat{\varrho}_e^2(t)] = 1 - \sum_k p_k^2(t). \quad (5.11)$$

A fenti formulák alapján kiszámítottuk a Neumann entrópia illetve a lineáris entrópia időtől való függését a folyamat során, ezeket az 5.6 és 5.7 ábrák mutatják. Látható, hogy a kezdeti állapotban is jelen van már bizonyos mértékű kvantumos összefonódottság, amely a lézerimpulzus hatására időben oszcillációkat mutatva végül beáll egy, a kezdetinél magasabb értékre. A lézertér erősödésével ezek az oszcillációk egyre markánsabbá válnak illetve az entrópia végső értéke is növekszik.

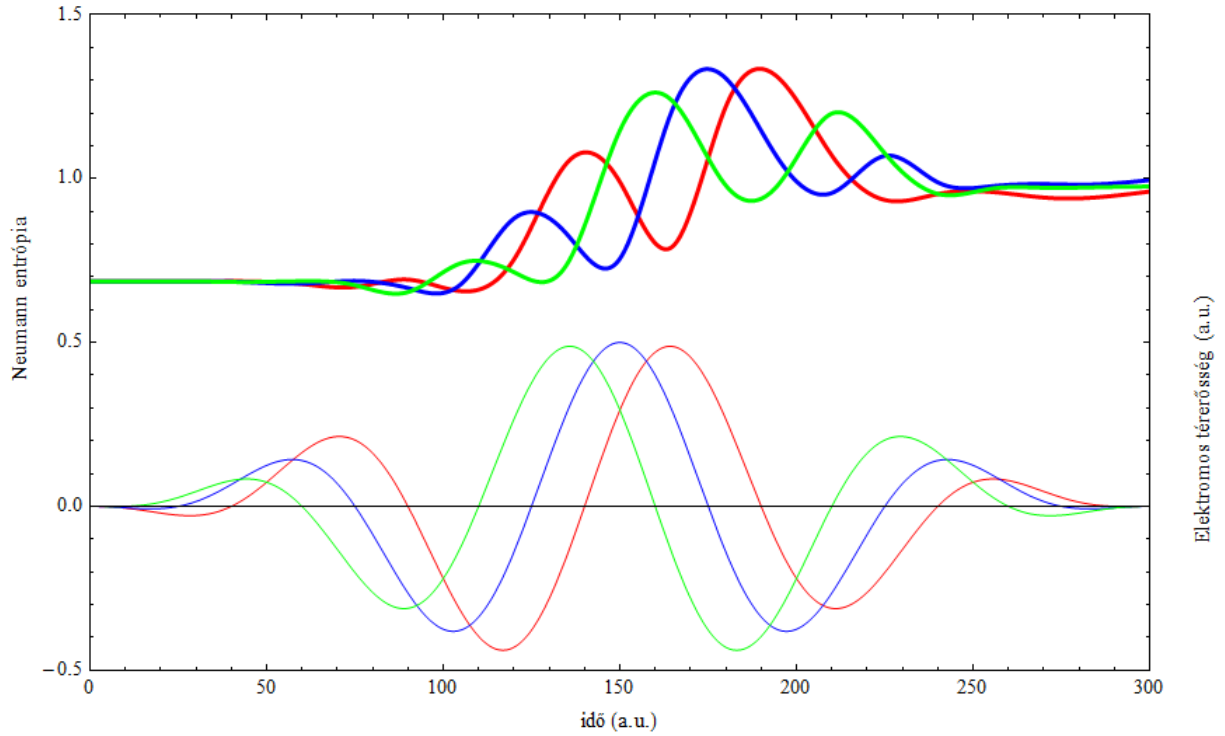


5.6. ábra. Neumann entrópia (5.10) görbék az idő függvényében (atomi egységekben), a lézerimpulzus elektromos terének egyre növekvő csúcsértékű eseteiben. Fekete görbe: a 3-ciklusú lézerimpulzus elektromos térerőssége az idő függvényében,. Színes görbék: Neumann entrópia $S_N(t)$ az idő függvényében, ha az elektromos térerősség csúcsértéke (F paraméter) 0.1 a.u. (kék), 0.15 a.u. (zöld), 0.2 a.u. (narancs), 0.25 a.u. (piros).

Az oszcillációk során mindkét összefonódottsági mérték lokális maximumai egybeesnek az elektromos tér zéróhelyeivel, mégpedig a lézerimpulzus vivő-burkoló fázistól (CEP) függetlenül. Ezt az érdekes tényt az 5.8 ábra szemlélteti.



5.7. ábra. Lineáris entrópia (5.11) görbék az idő függvényében (atomi egységekben), a lézerimpulzus elektromos terének egyre növekvő csúcsértékű eseteiben. Fekete görbe: a 3-ciklusú lézerimpulzus elektromos térerőssége az idő függvényében,. Színes görbék: Lineáris entrópia $S_L(t)$ az idő függvényében, ha az elektromos térerősség csúcsértéke (F paraméter) 0.1 a.u. (kék), 0.15 a.u. (zöld), 0.2 a.u. (narancs), 0.25 a.u. (piros).



5.8. ábra. Neumann entrópia (5.10) görbék az idő függvényében (atomi egységekben, felül, vastag vonallal), a lézerimpulzus (alul, vékony vonallal) vivő-burkoló fázisának különböző értékei esetén: kék görbék: $\text{CEP} = 0$, zöld görbék: $\text{CEP} = 0.3\pi$, piros görbék: $\text{CEP} = -0.3\pi$.

6. Összefoglalás

Dolgozatomban - a témakör irodalmi áttekintése után - az erős időfüggő külső mezővel való kölcsönhatást tartalmazó egydimenziós időfüggő Schrödinger-egyenlet véges-differencia módszerrel történő pontos numerikus megoldására alkalmas módszert és az ezt implementáló C++ program főbb tulajdonságait mutattam be. A program a Crank-Nicolson módszerre alapozva, de azt a Numerov módszerrel tovább pontosítva működik, a tesztelés során analitikus eredményekkel vetettem össze a numerikus eredményeket, a pontosságra vonatkozó vonatkozó jellemzőket részletesen ismerttettem.

A programra alapozott kutatásaink az attoszekundumos fizika egy egyszerű modelljével érdekes új eredményeket adnak. A Wigner függvényre alapozott fázisteres kvantum dinamika eredményei más modellekkel összhangban mutatják az újraszóródás eseményeit: a hullámcsomagok megjelenését, mozgását és interferenciáját. A magas harmonikus keltés Gabor-wavelet transzformációs analízisének eredménye szerint a felharmonikusok emissziójának bonyolult időbeli struktúrája van, ami erősen függ a vivő-burkoló fázis (CEP) értékétől. A kvantumos összefonódottsági mértékek oszcillációkat mutatnak, amelyek lokális maximumai egybeesnek az elektromos tér zéróhelyeivel, mégpedig a lézerimpulzus vivő-burkoló fázistól függetlenül.

Hivatkozások

- [1] Krausz F and Ivanov M. *Rev. Mod. Phys.*, 2009.
- [2] Milosevic D B et al. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 2006.
- [3] Sansone G et al. *Nature*, 2010.
- [4] Huismans Y et al. *Science*, 2011.
- [5] Chelkowski S and Bandrauk A D. *Phys. Rev. A*, 2010.
- [6] Niikura H et al. *Phys. Rev. Lett.*, 2011.
- [7] Goulielmakis E et al. *Nature*, 2010.
- [8] Fedorov M V et al. *Phys. Rev. A*, 2004.
- [9] Walters Z B and Smirnova O. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 2010.
- [10] B. H. Bransden and C.J. Joachain. *Physics of Atoms and Molecules*. Addison-Wesley, 2nd edition, 2003.
- [11] Walter Greiner. *Quantum Mechanics: An Introduction*. Springer, 4th edition, 2001.
- [12] S. Gräfe, J. Doose, and J. Burgdörfer. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 45:1–14, 2012.
- [13] P. B. Corkum. *Phys. Rev. Lett.*, 71:1994, 1993.
- [14] K. Varjú. *Am. J. Phys.*, 77:389, 2009.
- [15] M. Lewenstein et al. *Phys. Rev. A*, 1994.
- [16] Kenneth J. Shafer and Thomas Brabec (ed.). *Strong Field Laser Physics*, chapter Numerical Methods in Strong Field Physics, pages 111–145. Springer, 2009.
- [17] Landau L. D. and Lifshitz E. M. *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory Vol 3*. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1981.
- [18] Majorosi Szilárd. *Szakdolgozat*. SZTE, 2011.
- [19] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes: Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 3rd edition, 2007.
- [20] Curt A. Moyer. *Am. J. Phys.*, 72(3):351–358, 2004.

- [21] K. F. Riley, M. P. Hobson, and S. J. Bence. *Mathematical Methods for Physics and Engineering*. Cambridge University Press, 3rd edition, 2006.
- [22] Czirják A, Majorosi S, Kovács J, and Benedict M G. *AIP Conference Proceedings*, 2012.
- [23] Czirják A, Majorosi S, Kovács J, and Benedict M G. *Phys. Scr.*, 2013.
- [24] Hillery M, O'Connell R, Scully M, and Wigner E. *Phys. Rep.*, 1984.
- [25] W.P. Schleich. *Quantum Optics in Phase Space*. Berlin: Wiley-VCH, 2001.
- [26] Czirjak A, Kopold R, Becker W, Kleber M, and Schleich W P. *Opt. Com.*, 2000.
- [27] Benedict M G, Kovács J, and Czirják A. *J. Phys. A: Math. Theor.*, 2012.

Köszönetnyilvánítás

Ez úton szeretnék köszönetet mondani Dr. Czirják Attilának a program és a dolgozat elkészítéséhez nyújtott szakmai segítségért, és Dr. Benedict Mihály professzor úrnak hasznos tanácsaiért, továbbá a Szegedi Tudományegyetem Elméleti Fizikai Tanszéknek, hogy lehetőséget biztosított dolgozatom elkészítéséhez.

Munkánkat az OTKA T81364, valamint a TÁMOP-4.2.1/B-09/1/KONV-2010-0005, TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0060 és TÁMOP-4.2.2.C-11/1/KONV-2012-0010 kutatási pályázatok támogatták.