

SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI ÉS INFORMATIKAI KAR
ELMÉLETI FIZIKAI TANSZÉK

Tudományos Diákköri Dolgozat

**Optikai alagutazás klasszikus és kvantumos dinamikája
a fázistéren**

Készítette:
Hack Szabolcs
Fizikus MSc szakos hallgató

Témavezető:
Dr. Czirják Attila
tudományos munkatárs, c. egyetemi docens

Szeged, 2015. 01. 07.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	2
2. Attoszekundumos lézerimpulzus és atomi elektron kölcsönhatásának áttekintése	4
2.1. Lineárisan polarizált ultrarövid lézerimpulzus és atom kölcsönhatásakor lehetséges folyamatok	4
2.2. Az optikai alagúteffektussal történő ionizáció elméleti alapjai, a Keldysh elmélet	6
2.3. Lézertér és atom kölcsönhatásának leírásakor használt modellek	7
3. Intenzív lézertérrel kölcsönható atomi elektron klasszikus dinamikája	10
3.1. Monokromatikus lézertérrel kölcsönható atomi elektron mozgásegyenletének megoldása	11
3.2. Ultrarövid lézerimpulzussal kölcsönható atomi elektron mozgásegyenletének megoldása	12
3.3. 3-ciklusos lézerimpulzussal kölcsönható elektron klasszikus dinamikája . . .	13
3.4. A szakaszban bemutatott eredményeim összefoglalása	16
4. Intenzív lézertérrel kölcsönható atomi elektron kvantum dinamikája	18
4.1. Az egydimenziós Schrödinger-egyenlet megoldása	18
4.2. Az alkalmazott modell potenciálok	20
5. A klasszikus és a kvantum dinamikák összehasonlítása	23
5.1. A Wigner-függvény és momentumai	23
5.2. A klasszikus dinamika összehasonlítása a kvantum dinamikával Dirac-delta modell potenciál esetén	24
5.3. A klasszikus dinamika összehasonlítása a kvantum dinamikával soft-Coulomb modell potenciál esetén	33
5.4. A szakaszban bemutatott eredményeim összefoglalása	37
6. Az elektron egydimenziós és 3 dimenziós kvantum dinamikájának összehasonlítása	39
7. Az optikai alagúteffektus körülményeinek számítása detektált impulzusból	44
8. Összefoglalás	46
Hivatkozások	49

1. Bevezetés

Az ultragyors lézertechnika utóbbi két évtizedbeli fejlődése napjainkra már a néhány fs hosszúságú és csupán néhány optikai ciklusból álló ultrarövid lézerimpulzusok rutinszerű létrehozását is lehetővé teszi, kontrollált vivő-burkoló fázissal, olyan nagy intenzitástartományban, ami már alkalmas arra, hogy szabad atomok kontrollált ionizációjával és rekombinációjával magas harmonikus (tipikusan XUV) fotonokat keltsen (high harmonic generation, HHG). Ezek a fotonok alkalmas körülmények között attoszekundumos fényimpulzussá szuperponálhatóak, amelyek segítségével az atomi, azaz a néhány 10 as időskálán lejátszódó folyamatok is kísérletileg vizsgálhatóvá, időben nyomon követhetővé váltak, leggyakrabban pumpa-próba kísérletekkel. Ezt a tudományterületet napjainkra már összefoglalóan attoszekundumos fizikának szokás nevezni, ami az atomi mellett molekuláris és szilárdtest-felületi folyamatok korábban elképzelhetetlen időfelbontású vizsgálataiban is nagy sikereket ért el.

A HHG szempontjából kulcsfontosságú elemi folyamat kezdőlépése az lézerimpulzus által lehetővé tett alagúteffektus, ami egy mélyen kvantumos folyamat. Az ennek révén az atomból kiszakított elektron már döntő mértékben az intenzív lézerimpulzus hatása alatt mozog, ami viszont klasszikus fizikával is elég pontosan leírható. Ez a kettősség gyakran megjelenik az attoszekundumos fizika sok területén: a bonyolult kvantumos folyamatok révén keletkezett elektronok előbb-utóbb lényegében a lézerimpulzus hatása alá kerülnek, ami már klasszikusan is jól modellezhető, így viszonylag könnyű visszakövetkeztetni az eredeti kvantumos folyamatokra. Dolgozatomban pontosan ennek a kétféle megközelítésnek a minél pontosabb összeillesztését igyekszem megvalósítani az optikai alagutazás elméleti vizsgálatával kapcsolatban.

Az első részben áttekintjük, hogy milyen folyamatok játszódhatnak le akkor, amikor egy atomban kötött elektron kölcsönhat egy ultrarövid lézerimpulzussal, illetve megemlítjük azokat az elméleti modelleket, melyek egy ilyen problémát kezelni tudnak, és kísérletileg ellenőrzött jóslatokat tesznek az egyes folyamatok kimeneteleire.

A dolgozat második részében rátérünk saját eredményeink ismertetésére. Az általunk vizsgált folyamat a (tulajdonképpen modellként használatos) hidrogén atomba kötött elektron alagúteffektussal való kijutása és az alagutazás utáni dinamikája a lézertér hatása alatt. Az optikai alagutazással kapcsolatban ugyanis több olyan alapvető kérdés van, amelyek jelentősen befolyásolják bizonyos kísérleti eredmények értelmezését is: ilyen pl. az alagutazási idő, vagy a kezdő impulzus kérdése. Először egy klasszikus, a Newton-Lorentz egyenletekből analitikusan származtatható megoldását adunk az atomtörzstől elszakadt elektron alagúteffektus utáni dinamikájára, és közelítő összefüggést adunk arra, hogy mérhető mennyiségekből, hogyan lehet visszakövetkeztetni az alagúteffektus körülményeire. Ezt a témát Wang és Eberly [1] munkája inspirálta, akik megmutatták, hogy teljesen klasszikus módszerekkel is sok hasznos információt nyerhetünk többszörös ionizációs fo-

lyamatokról elliptikusan poláros lézertér esetén.

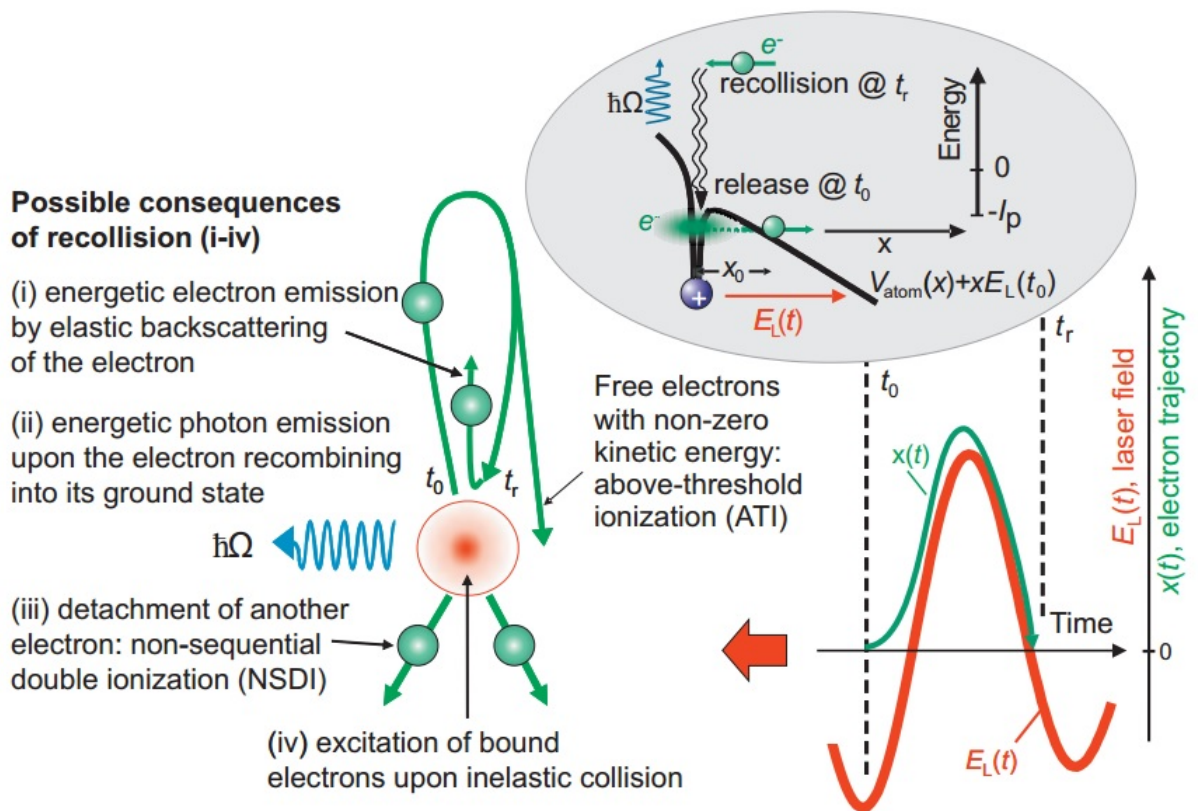
Ezután rátérünk a probléma kvantummechanikai leírására. Numerikusan megoldva a hidrogén atomba kötött alapállapotú elektron intenzív lézertérrel történő kölcsönhatását leíró időfüggő egydimenziós Schrödinger-egyenlet, olyan mennyiségeket keresünk, amelyekkel a kvantumos dinamika összevethető a klasszikussal a fázistéren. Ilyen a Wigner-függvény és a kvantum momentum függvény, amelyeket egy háromdimenziós szimuláció eredményeivel is összehasonlítunk, tehát ezen mennyiségek segítségével próbálunk átfogóbb képet kapni az optikai alagúteffektusról.

A dolgozatban az attoszekundumos fizikában megszokott atomi egységrendszert használtuk, azaz az elektron tömege, az elemi töltés és a redukált Planck-állandó értékét egységnyinek választjuk, és minden más mennyiség értéke ezen mennyiségek alapján van származtatva. ($m_e = 1$, $e = 1$ és $\hbar = 1$).

2. Attoszekundumos lézerimpulzus és atomi elektron kölcsönhatásának áttekintése

Ebben a szakaszban áttekintjük, hogy milyen folyamatok játszódhatnak le akkor, amikor egy egyedülálló atom kölcsönhat egy folytonos lézertérrel vagy akár néhány ciklusos lézerimpulzussal, valamint hogy a szakirodalomban milyen elméleti modellek láttak napvilágot az intenzív lézerimpulzus és atom kölcsönhatásának leírására.

2.1. Lineárisan polarizált ultrarövid lézerimpulzus és atom kölcsönhatásakor lehetséges folyamatok



1. ábra. Az intenzív lézerimpulzus és egy atom kölcsönhatásakor lejátszódó lehetséges folyamatok, Krausz és Ivanov cikke alapján [2]. Az ionizációs idő t_0 és a visszatérési idő t_r függvényében több folyamat is számottevő valószínűséggel lejátszódhat. Egy atom és egy lineárisan polarizált ultrarövid lézerimpulzus kölcsönhatása során detektálhatunk rugalmasan visszaszórt elektront (i), ionizálódott elektront (ATI) (ii), az atommagtól elszakadt másik elektront (NSDI) (iii), illetve rugalmatlan szórás következtében az atom gerjesztett állapotba is kerülhet (iv). Az ábrán szemléltetve van továbbá, hogy az atomban kötött elektron hogyan jut ki alagúteffektussal az atomi Coulomb-potenciál és a lézertér potenciáljának összegéből képzett potenciálgáton.

Ahhoz, hogy teljes képet kaphassunk a dolgozat központi témáját képző optikai alagúteffektus fontosságáról tekintsük át, hogy milyen folyamatok lehetségesek akkor, amikor

egy ultrarövid, pár ciklusos lézerimpulzus kölcsönhat egy egyedülálló atommal. Ahogy az 1. ábrán látható több folyamat is lejátszódhat akkor, amikor egy lineárisan polarizált lézerimpulzus kölcsönhat egy atommal. Attól függően, hogy az elektron a lézertér vagy lézerimpulzus melyik fázisában ionizálódik elképzelhető, hogy a végtelenbe távozik az elektron, de az is lehetséges, hogy a lézertér hatására a korábban ionizálódott elektron visszatér az atomtörzshöz és ott különböző folyamatok játszódhatnak le.

Lehetséges, hogy az elektron rugalmasan szóródik az atomtörzsen és a detektor az így visszaszóródott elektront detektálja.

Elképzelhető az is, hogy az elektron rekombinálódik az atomtörzzsel, és a lézertérből nyert kinetikus energiája valamint az atomi ionizációs potenciál összegének megfelelő energiájú fotont emittál az atom.

$$\hbar\Omega = E_{kin} + I_p \quad (1)$$

ahol $\hbar\Omega$ a kibocsátott foton energiája, E_{kin} és I_p pedig az elektron kinetikus energiája a rekombinációt megelőzően és az atom ionizációs potenciálja. Ezt a folyamatot nevezik magasrendű harmonikus keltésnek vagy röviden HHG-nek.

Beszélhetünk még intenzív lézertérben lejátszódó kettős ionizációs folyamatokról, amelyeket két külön kategóriába tudjuk sorolni, név szerint Sequential Double Ionization (SDI) vagy Nonsequential Double Ionization (NSDI). Az Sequential Double Ionization, ahogy a neve is mutatja annyit tesz, hogy két elektron egymás után ionizálódik, és köztük számottevő kölcsönhatás nincs. A Nonsequential Double Ionization, hogy a két elektron majdnem egy időben ionizálódik és köztük számottevő korreláció van. Mivel a mi kutatásunk a hidrogén atomba kötött elektron és ultrarövid lézerimpulzus kölcsönhatására terjed ki, ezért ezt a folyamatot nem vizsgáltuk.

Az előzőekben említetten kívül lehetséges még több olyan ionizációs folyamat, amikor csak egyetlen elektron távozik az atomtörzstől. Az egyik ilyen a küszöb feletti ionizáció, angolul Above Threshold Ionization (ATI), amely egy többfotonos folyamat vagy hogy az angolszász szakirodalomban nevezik Multiphoton Ionization (MPI). A többfotonos ionizációs folyamatokat perturbáció számítással modellezték (Farbe *et al* 1982, Petite *et al* 1984), az n -fotonos ionizáció valószínűségét az alábbi képlet szabja meg

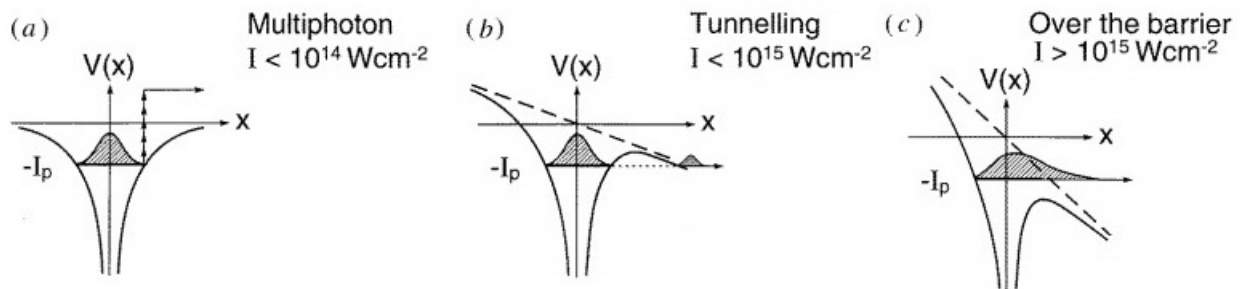
$$\Gamma_n = \sigma_n I^n, \quad (2)$$

ahol n az ionizációhoz szükséges minimális fotonszám, σ_n az általánosított hatáskeresztmetszet és I a bejövő lézertér intenzitása. A (2) képlet csak egy bizonyos I_s kritikus intenzitásig helyes, felette megváltozik az intenzitásfüggés (Lompré *et al.* 1985). Ez az intenzitás ma szaturációs intenzitásként ismert. Annak ellenére, hogy a (2) kifejezés egyszerűnek tűnik, komoly komplikációt jelent a σ_n elméleti meghatározása, különösen rezonancia vagy ahhoz közeli esetben. További problémákat jelent az az eset, amikor

a lézertér elektromos térerőssége olyan nagy, hogy összemérhető az atomtörzshöz közeli Coulomb-térerősséggel. Ekkor ugyanis a perturbációs számítás már nem alkalmazható, és az atomi szintek eltolódást szenvednek a lézertérrel történő erős csatolás miatt. Ez az úgy nevezett AC-Stark eltolódás (Freeman *et al* 1987). A küszöb feletti ionizációs folyamat pedig ebbe, perturbatív nem leírható régióba esik. Ekkor ugyanis több foton van jelen az ionizációkor, mint amennyi szükséges. Klasszikusan úgy gondolhatunk erre a folyamatra, mint a bejövő lézertér által eltorzított atomi potenciálra, ami alacsonyabbra kerül, mint az elektron ionizációs energiája, így az elektron kiszabadul a kötésből.

Számunkra most leginkább fontos folyamat az optikai alagúteffektussal történő ionizáció, amely fontos szerepet játszik jó néhány fent említett atomi folyamatnál, és ez az effektus képezi a dolgozat központi témáját, éppen ezért ezen ionizációs effektus elméleti leírásával egy külön alszakaszban foglalkozunk.

2.2. Az optikai alagúteffektussal történő ionizáció elméleti alapjai, a Keldysh elmélet



2. ábra. A három fő lehetséges ionizációs folyamat sematikus diagramja, Protopapas és szerzőtársai cikke alapján [3]. Az (a)-n az intenzitás kisebb mint $\sim 10^{14} \frac{\text{W}}{\text{cm}^2}$, ekkor a multifoton ionizációs folyamat a domináns. Ha az intenzitás növekszik, akkor a potenciál torzul és az alagúteffektus valószínűsége megnő (b). Még nagyobb intenzitások esetén a potenciál annyira torzul, hogy a kezdeti hullámcsomag szabadon eltávozhat az atomi potenciáltól. Ez az ún. potenciálgát feletti ionizáció (c).

Az optikai alagúteffektussal történő ionizáció elméleti alapjait Leonid Veniaminovich Keldysh 1965-ben fektette le [4]. Amennyiben a lézertér intenzitása elég nagy és/vagy a frekvenciája pedig elég alacsony akkor van esély arra, hogy az elektron alagúteffektussal átjut az atomi Coulomb-potenciál és a lézertér potenciáljának összegéből képzett potenciálgáton. Az alacsony frekvencia azért kell, hogy az elektron által érzett potenciált kvázi-stacionáriusnak lehessen tekinteni, a nagy térerősség pedig ahhoz, hogy a gát elég keskeny legyen. Amennyiben azonban a térerősség túl nagy a potenciálgát torzul és az alapállapot sem lesz többé kötött. Ekkor már potenciálgát feletti ionizációról beszélünk.

Miután az elektron optikai alagúteffektussal átjutott a potenciálgáton, klasszikus töl-

tött részecskeként van kezelve, ami a lézertér hatása alatt mozog. A kezdeti sebességét és irányát a lézertér fázisa határozza meg az elektron „születésének” időpillanatában [5]. Ez azt jelenti, hogy az ionizációs folyamat nagyon gyorsan zajlik le, legnagyobb valószínűséggel minden optikai ciklusban az impulzus maximumai közelében, ahol az eredeti Coulomb-potenciált a leginkább torzítja a lézertér. Az optikai alagúteffektussal történő ionizáció egy kvantummechanikai effektus, ezért így is kell kezelni. Végző állapotnak egy Volkov állapotot (Volkov, 1935) választva a probléma jól leírható [6].

Az, hogy melyik ionizációs csatorna van „nyitva”, azaz hogy melyik ionizációs folyamatnak nagyobb a valószínűsége mennyiségileg is jellemezhető az úgy nevezett Keldysh paraméterrel.

$$\gamma^2 = \frac{2\omega^2 I_p}{I} \quad (3)$$

ahol ω a lézerimpulzus frekvenciája, I_p és I az ionizációs potenciál és a lézertér intenzitása. Amennyiben $\gamma < 1$ az alagúteffektussal történő ionizációs folyamat a domináns, de ha $\gamma > 1$ akkor a multifotonos ionizációs folyamat a leginkább jelentős. Az ionizáció ilyenfajta viselkedését kísérletileg is kimutatták az ionizációs spektrumból. Amikor a Keldysh gamma jelentősen különbözik egytől, akkor tényleg csak az egyik ionizációs csatorna van nyitva, amikor azonban közel egy, akkor a spektrum nagyon összetett. [3]

2.3. Lézertér és atom kölcsönhatásának leírásakor használt modellek

Az intenzív ultrarövid lézertér és anyag kölcsönhatásának leírására több különböző közelítő modell van, melyek mindegyike jól használható a kölcsönhatás bizonyos folyamatainak leírására. Ezen közelítések a klasszikus, a szemi-klasszikus, az egyetlen aktív elektron közelítés röviden SAE és az erős tér közelítés vagy röviden SFA.

A legkézenfekvőbb és legegyszerűbb közelítés a klasszikus közelítés. Ekkor mind a lézerteret mind az elektront a klasszikus fizika eszközével írjuk le. A lézerteret az elektromos térerősség vektorával jellemezzük, amely általános alakja dipólközelítésben (azaz az atomi méretskálán a helyfüggéstől eltekintve)

$$\mathbf{E}(t) = E_0 f(t) \sum_{j=1,2} \varepsilon_j \hat{\mathbf{e}}_j \sin(\omega t + \varphi_j),$$

ahol E_0 az elektromos térerősség oszcillációjának amplitúdója, $f(t)$ az impulzus burkolója, ε_j az ellipticitás, $\hat{\mathbf{e}}_j$ egységvektor, ω a lézertér körfrekvenciája és φ_j a fázis. Megjegyezzük, hogy szokás még a lézerteret a térerősség vektora helyett a vektorpotenciáljával is jellemezni. Az elektront pedig a klasszikus közelítésben töltéssel rendelkező klasszikus tömegpontnak tekintjük, melynek a dinamikáját a Newton-Lorentz-egyenlet segítségével írjuk le, ami atomi egységrendszerben az alábbi alakú:

$$\ddot{\mathbf{r}} = -(\mathbf{E}(t) + \dot{\mathbf{r}}(t) \times \mathbf{B}(t)) + \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i \quad (4)$$

ahol $\mathbf{B}(t) = \frac{1}{c}(\mathbf{n} \times \mathbf{E}(t))$ az $\mathbf{n}$ irányban haladó impulzus mágneses indukció vektora, ami nagy intenzitások esetén már jelentősen befolyásolhatja az elektron dinamikáját és $\mathbf{F}_i$ az elektronra ható egyéb erők, általában atomi potenciál. Természetesen kis intenzitásoknál el szokás tekinteni a lézertér mágneses részétől. A klasszikus közelítés előnye, hogy sok esetben - mint arra később példát is fogunk mutatni - analitikusan megoldható differenciálegyenlet rendszerhez vezet, vagy ha analitikusan nem is oldható meg, de a numerikus megoldása közel sem igényel akkora erőforrásokat, mint a másik két közelítés. További előnye, hogy segítségével egyszerű és szemléletes képet nyerhetünk az atomi folyamatokról. Hátránya persze, hogy az elektront klasszikus részecskeként kezeli, ezért nem tud számot adni a lézertér és atom kölcsönhatásakor lejátszódó kvantummechanikai effektusokról, mint az optikai alagúteffektussal történő ionizáció vagy az iontörzshöz visszatérő elektron rekombinációja. Mégis jó néhány esetben hatékonyan alkalmazható ionizációs és visszatérési idők [5] számolására, illetve ionizációs [1] és HHG spektrum kalkulálására, alkalmasan megválasztott kezdeti és peremfeltételekkel.

A kvantummechanikai (szemi-klasszikus) tárgyalásban az elektron már a hozzárendelt hullámfüggvénnyel van jellemezve, viszont a lézertér a nagy fotonszám miatt a klasszikus (??) mennyiséggel. Az elektron dinamikájáról az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldásából nyerhetünk információt. A Schrödinger-egyenlet egy három dimenzióban és koordináta reprezentációban:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = [H_0 + H_{int}] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (5)$$

ahol H_0 az időfüggetlen Hamilton-operátor, koordináta reprezentációban:

$$H_0 = -\frac{1}{2} \Delta + V_0(\mathbf{r}) \quad (6)$$

ahol m az elektron tömege, $V_0(\mathbf{r})$ pedig az atomi Coulomb potenciál. A (5) egyenletben H_{int} az időfüggő, elektromos része a Hamilton-operátornak, ami a kölcsönhatást írja le. Ezen tárgyalás nagy előnye, hogy ez már az elektront kvantummechanikai részecskeként veszi figyelembe, és a hozzárendelt hullámfüggvényével jellemzi, így több információt szolgáltat a klasszikus közelítésnél, és számot tud adni például az optikai alagúteffektusról. Nagy hátránya viszont az a klasszikus közelítéshez képest, hogy a (5) egyenlet numerikus megoldása rettentően erőforrás igényes, sőt amíg a Newton-Lorentz-egyenletet könnyedén 3 dimenzióban is meg lehet oldani numerikusan, addig a Schrödinger-egyenlet 3 dimenziós numerikus megoldásához szuperszámítógépre van szükség. Ezért szokták általában csak az egydimenziós határesetét tárgyalni, ami viszont lineárisan polarizált lézerterek esetén

meglepően jó közelítésnek bizonyul.

Az egyetlen aktív elektron közelítés vagy ahogy a szakirodalomban nevezik Single Active Electron Approximation (SAE) ahogyan a neve is mutatja abból áll, hogy feltételezzük, hogy a lézertérrel csak az atom egyetlen, legkülső héjon fekvő elektronja tud kölcsönhatni. Ez a közelítés remekül működik hidrogén-szerű ionok, alkálifémek és alkáli földfémek egyszeresen ionizált atomjai esetén és abban az esetben is, amikor a lézertér úgy van „hangolva”, hogy kicsi annak az esélye, hogy egyszerre több elektront is gerjesszen. A közelítés merőben leegyszerűsíti lézerpulzus és többelektronos atomok kölcsönhatásának leírását, amennyiben az atom eleget tesz az előzőekben leírt feltételeknek.

Az erőstér közelítés avagy Strong Field Approximation (SFA) alapjául szolgál szinte minden analitikus megközelítésének olyan folyamatoknál, mint ATI, HHG vagy NSDI, atomok és molekulák esetén egyaránt. Röviden, a közelítés azon alapul, hogy az atom vagy molekula eredeti kötött állapotát nem befolyásolja a lézertér, miközben a végső állapotot, ami a kontinuumban van, már nem befolyásolja a kötő, atomi potenciál [7].

Megjegyezzük, hogy természetesen további közelítések is léteznek, mi most csak a dolgozat szempontjából legfontosabbakat, legtöbbet alkalmazottakat tekintettük át.

3. Intenzív lézertérrel kölcsönható atomi elektron klasszikus dinamikája

Ebben a szakaszban azt vizsgáljuk a klasszikus Newton-Lorentz egyenleten keresztül, miként mozog egy atomi elektron intenzív lézertér hatása alatt, illetve hogy az elektron impulzusát megmérve milyen állításokat tudunk tenni a kölcsönhatás egyes aspektusaira. Analitikus leírását szeretnénk adni a problémának, és egyes mérhető mennyiségek által visszakövetkeztetni, az optikai alagúteffektus körülményeire, hogy szemléletes képet alkothassunk, mi történik az elektronnal az ionizációt követően. A lézertér $\mathbf{x}$ -irányban lineárisan polarizáltnak tételezzük fel, amely $\mathbf{z}$ -irányban terjed. Az elektromos térerősség időfüggését a polarizáció irányába az alábbi összefüggés írja le:

$$E(t, \phi) = E_0 f(t) \sin(\omega t + \phi) \quad (7)$$

ahol E_0 a lézertér oszcillációjának amplitúdója, $f(t)$ az impulzus burkolója, és ω a lézer körfrekvenciája, ϕ pedig az impulzus fázisa az ionizáció pillanatában.

Az időfüggő Newton-egyenleteknél a lehető legkevesebb elhanyagolással élünk annak érdekében, hogy az elektron mozgását befolyásoló tényezők közül minél többet figyelembe tudjunk venni, mégis a probléma analitikusan kezelhető maradjon. Így elhanyagoltuk az ionizációt követően az iontörzs Coulomb-potenciálját, ez egyébként bevált közelítés az erős-tér fizikában, az angolszász szakirodalomban „simpleman picture”-ként említik. Megtartottuk viszont a bejövő lézertér mágneses tagját, ami a manapság használt intenzitásoknál már mérhetően befolyásolhatja az ionizálódott elektron mozgását. A másik fontos nem elhanyagolható szempont az, hogy bár a legtöbb elmélet az alagutazás után zérus kezdőimpulzussal oldja meg a mozgásegyenleteket, mi megmutatjuk, hogy nem nulla kezdőimpulzussal is analitikusan kezelhető a probléma, és ennek a fizikailag megalapozott kezdeti feltételnek hatása van az elektron dinamikájára. Két esetben oldjuk meg analitikusan a mozgásegyenleteket. Az egyik amikor állandó amplitúdójú, monokromatikus elektromágneses síkhullámmal hat kölcsön az atom (azaz, praktikusán egy hosszú lézerimpulzussal, amelynek a burkolója az ionizáció folyamatához képest lassan változik). A másik eset amikor szinuszos négyzet burkolójú ultrarövid lézerimpulzussal hat kölcsön az atom.

3.1. Monokromatikus lézertérrel kölcsönható atomi elektron mozgásegyenletének megoldása

A (4) képlet alakja az optikai alagúteffektussal a potenciálgáton átjutott elektronra, amikor az atomi Coulomb-potenciált elhanyagoljuk:

$$\ddot{\mathbf{r}} = -(\mathbf{E}(t) + \dot{\mathbf{r}}(t) \times \mathbf{B}(t)). \quad (8)$$

Az esetünkben előforduló sebességek nem érik el a fénysebesség 1 százalékát sem, így a problémát a szakirodalommal összhangban nemrelativisztikus megközelítésben tárgyaljuk. Válasszuk a koordináta-rendszerünket úgy, hogy a lézertér $\mathbf{x}$ -irányban legyen polarizált és $\mathbf{z}$ -irányban terjedjen. Ekkor a mozgásegyenletnek két nem nulla komponense lesz, mégpedig a polarizáció és a terjedés iránya. Vagyis az általunk választott koordináta-rendszerben ezen két irány által meghatározott síkban megy végbe az ionizációs folyamat. Tehát az ionizációt követően az elektron mozgásegyenletei atomi egységrendszert használva a következők:

$$\begin{aligned} \frac{dp_x(t, \phi)}{dt} &= -E_0 \sin(\omega t + \phi) \left(1 - \frac{1}{c} p_z(t)\right) \\ \frac{dp_z(t, \phi)}{dt} &= -\frac{1}{c} E_0 \sin(\omega t + \phi) p_x(t). \end{aligned} \quad (9)$$

A differenciálegyenlet rendszerben síkhullám van feltételezve, de egy lassan változó burkoló, amely az elektron mozgása során - az ionizációtól a virtuális detektorig - alig változik, így az integrálási időtartam alatt állandó, minden további nélkül hozzáadható. A mozgásegyenlet analitikusan megoldható. A feltételezett kezdőimpulzusok pedig $p_x(t=0) = p_x^0$ és $p_z(t=0) = p_z^0$. A megoldások:

$$\begin{aligned} p_x(t, \phi) &= p_x^0 \cos\left(\frac{E_0 [\cos(\phi) - \cos(\omega t + \phi)]}{c\omega}\right) + \\ &\quad (-c + p_z^0) \sin\left(\frac{E_0 [\cos(\phi) - \cos(\omega t + \phi)]}{c\omega}\right) \\ p_z(t, \phi) &= c + (-c + p_z^0) \cos\left(\frac{E_0 [\cos(\phi) - \cos(\omega t + \phi)]}{c\omega}\right) + \\ &\quad p_x^0 \sin\left(\frac{E_0 [\cos(\phi) - \cos(\omega t + \phi)]}{c\omega}\right) \end{aligned} \quad (10)$$

Ha feltesszük, hogy az elektront t_1 időpillanatban detektáljuk, akkor a megoldásokat kiértékelve ebben az időpillanatban egy két egyenletből álló háromismeretlenes egyenletrendszert kapunk, az ionizáció ϕ fázisára és a kezdőimpulzusokra. Az egyenletrendszer fokozatos közelítések módszerével megoldható, első közelítésben a $\mathbf{z}$ -irányú kezdőimpulzust nullának véve. Viszont a közelítés pontosságának ellenőrzése komoly gondot jelent,

és már analitikusan nem kezelhető. Jobban kezelhető megoldást kapunk, ha egy gyorsan változó burkolójú, néhány ciklusos impulzussal oldjuk meg a mozgásegyenleteket.

3.2. Ultrarövid lézerimpulzussal kölcsönható atomi elektron mozgásegyenletének megoldása

Ebben az alszakaszban azt az esetet fogjuk tárgyalni, amikor az egyedülálló atom egy pár ciklusos szinusz négyzet burkolójú lézerimpulzussal hat kölcsön. A lézerimpulzust szintén $\mathbf{x}$ -irányban polarizálnak és $\mathbf{z}$ -irányban terjedőnek tételezzük fel. A polarizáció irányában az impulzus elektromos térerősségének időfüggése a $0 \leq t \leq 300$ tartományon

$$E(t, \phi) = E_0 \sin^2(\omega_0 t + \delta) \cos(\omega t + \phi) \quad (11)$$

máshol pedig azonosan nulla. Itt E_0 továbbra is az impulzus térerősség oszcillációjának amplitúdója, ω_0 a burkoló körfrekvenciája, δ a burkoló fázisa az ionizáció pillanatában, és ω és ϕ pedig a már korábban bevezetett körfrekvencia és fázis az ionizáció pillanatában. Látható, hogy a (11) kifejezésben a vivő-burkoló fáziskülönbséget zérusnak tételeztük fel. Később visszatérünk rá, hogy mi történik akkor, ha a mozgásegyenletet úgy próbáljuk megoldani, hogy független paraméterként a vivő-burkoló fáziskülönbséget is benne hagyjuk a mozgásegyenletben.

Ahhoz, hogy a mozgásegyenlet egyszerűbben kiintegrálható legyen, alakítsuk át a (11) kifejezést elsőrendű trigonometrikus függvények összegére felhasználva az alábbi jól ismert trigonometrikus összefüggéseket:

$$\sin^2(x) = \frac{1 - \cos(2x)}{2} \quad (12)$$

$$\sin(x) \cos(y) = \frac{\sin(x - y) + \sin(x + y)}{2}. \quad (13)$$

Ekkor a mozgásegyenlet alakja a következő:

$$\begin{aligned} \frac{dp_x(t, \phi)}{dt} = & -E_0 \left\{ \sin(\omega t + \phi) - \frac{1}{2} [\sin((\omega t + \phi) - 2(\omega_0 t + \delta)) \right. \\ & \left. + \sin((\omega t + \phi) + 2(\omega_0 t + \delta))] \right\} \left(1 - \frac{1}{c} p_z(t) \right) \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \frac{dp_z(t, \phi)}{dt} = & -E_0 \left\{ \sin(\omega t + \phi) - \frac{1}{2} [\sin((\omega t + \phi) - 2(\omega_0 t + \delta)) \right. \\ & \left. - \frac{1}{c} E_0 + \sin((\omega t + \phi) + 2(\omega_0 t + \delta))] \right\} p_x(t). \end{aligned} \quad (15)$$

Az egyenlet azzal a kezdőfeltétellel, hogy $p_x(t = 0) = p_x^0$ és $p_z(t = 0) = p_z^0$ minden további

nélkül kiintegrálható, és a megoldások:

$$p_x(t, \phi) = p_x^0 \cos(\alpha(t)) + (-c + p_z^0) \sin(\alpha(t)) \quad (16)$$

$$p_z(t, \phi) = c + (-c + p_z^0) \cos(\alpha(t)) - p_x^0 \sin(\alpha(t)) \quad (17)$$

ahol

$$\begin{aligned} \alpha(t) = & \frac{E_0}{4c\omega(\omega^2 - 4\omega_0^2)} [-\omega(\omega + 2\omega_0) \cos(2\delta - \phi) + 2(\omega^2 - 4\omega_0^2) \cos(\phi) \\ & - \omega^2 \cos(2\delta + \phi) + 2\omega\omega_0 \cos(2\delta + \phi) - 2\omega^2 \cos(\omega t + \phi) \\ & + 8\omega_0^2 \cos(\omega t + \phi) + \omega^2 \cos(2\delta - \phi - \omega t + 2\omega_0 t) \\ & + 2\omega\omega_0 \cos(2\delta - \phi - \omega t + 2\omega_0 t) + \omega(\omega - 2\omega_0) \cos(2\delta + \phi + \omega t + 2\omega_0 t)] \end{aligned} \quad (18)$$

A fenti kifejezésekben E_0 továbbra is az elektromos térerősség amplitúdója, ω_0 a burkoló, δ a burkoló fázisa az ionizáció pillanatában, ω és ϕ pedig a szokásos körfrekvencia és fázis. Látható, hogy a mozgásegyenlet megoldható, abban az esetben is, ha benne szabad paraméterként hagyjuk a burkoló leírására szolgáló ω_0 -t és δ -t. A mozgásegyenlet akkor is megoldható analitikusan, amikor szinusz burkolójú impulzust tételezünk fel. A továbbiakban a problémát nem ennyire általánosan tárgyaljuk, hanem egy 3-ciklussal rendelkező szinusz négyzet burkolójú lézerimpulzust tételezünk fel, és az ionizált elektron mozgását ezen lézertér hatása alatt vizsgáljuk.

3.3. 3-ciklusos lézerimpulzussal kölcsönható elektron klasszikus dinamikája

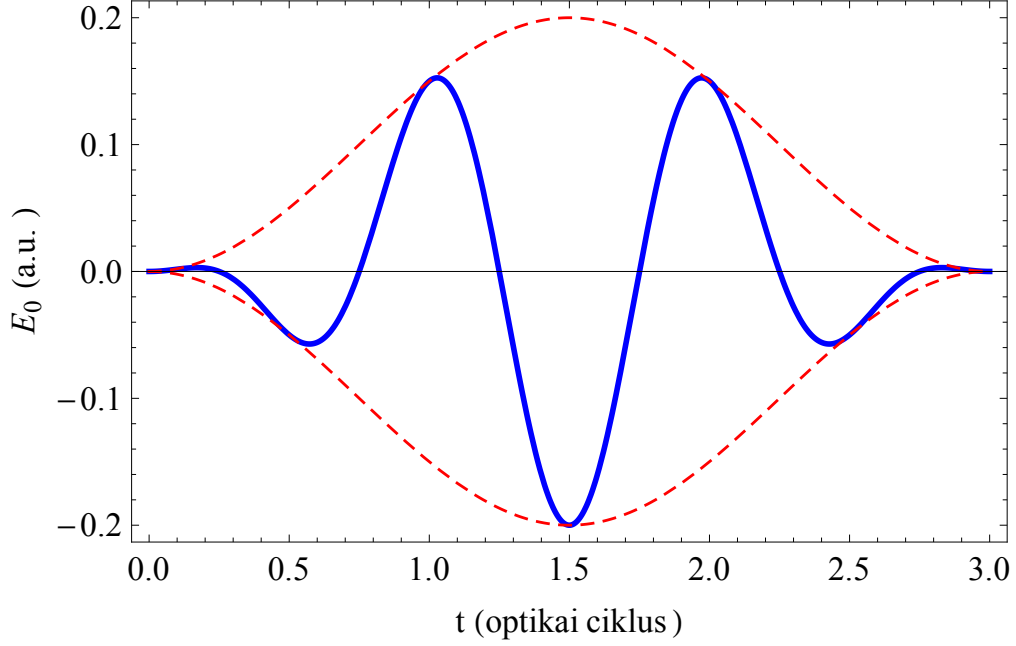
Vizsgáljuk most azt az esetet, amikor az impulzus egy szinusz négyzet burkolójú 3-ciklusos koszinuszos impulzus (3. ábra). A vivő-burkoló fáziskülönbséget nullának választjuk. Ekkor $\omega_0 = \omega/6$ és $\delta = \phi\omega_0/\omega$ kell behelyettesítenünk. Ebben az esetben az analitikus megoldás alakja a következő:

$$p_x(t, \phi) = p_x^0 \cos(\beta(t, \phi)) + (c - p_z^0) \sin(\beta(t, \phi)) \quad (19)$$

$$p_z(t, \phi) = c + (p_z^0 - c) \cos(\beta(t, \phi)) + p_x^0 \sin(\beta(t, \phi)) \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \beta(t, \phi) = & \frac{E_0}{16c\omega} \left(-6 \sin\left(\frac{2\phi}{3}\right) + 8 \sin(\phi) - 3 \sin\left(\frac{4\phi}{3}\right) + \right. \\ & \left. 6 \sin\left(\frac{2}{3}(\omega t + \phi)\right) - 8 \sin((\omega t + \phi)) + 3 \sin\left(\frac{4}{3}(\omega t + \phi)\right) \right). \end{aligned} \quad (21)$$

Tegyük fel, hogy az elektront akkor detektáljuk, miután az elektron kölcsönhatott a teljes lézerimpulzussal. Ezután feltevéseink szerint az elektronra nem hat semmilyen erő, így az impulzusa sem változik ezután. Tehát feltehetjük, hogy az általunk detektált impulzus megegyezik a $p_x(t)$ és $p_z(t)$ függvények az impulzus végén felvett értékével. Értékeljük ki



3. ábra. Lineárisan polarizált szinusz négyzet burkolójú 3-ciklusos impulzus térerősségvektorának időfüggése a polarizáció irányában (kék görbe) és az impulzus burkolója (piros szaggatott görbe)

tehát az impulzus - idő függvényeket a $t_f = (6\pi - \phi)/\omega$ helyen.

$$p_x^d(\phi) = p_x(t_f, \phi) = p_x^0 \cos(\beta(t_f, \phi)) + (c - p_z^0) \sin(\beta(t_f, \phi)) \quad (22)$$

$$p_z^d(\phi) = p_z(t_f, \phi) = c + (p_z^0 - c) \cos(\beta(t_f, \phi)) - p_x^0 \sin(\beta(t_f, \phi)) \quad (23)$$

$$\beta(\phi) = \beta(t_f, \phi) = \frac{E_0}{16c\omega} \left(6 \sin\left(\frac{2\phi}{3}\right) - 8 \sin(\phi) + 3 \sin\left(\frac{4\phi}{3}\right) \right) \quad (24)$$

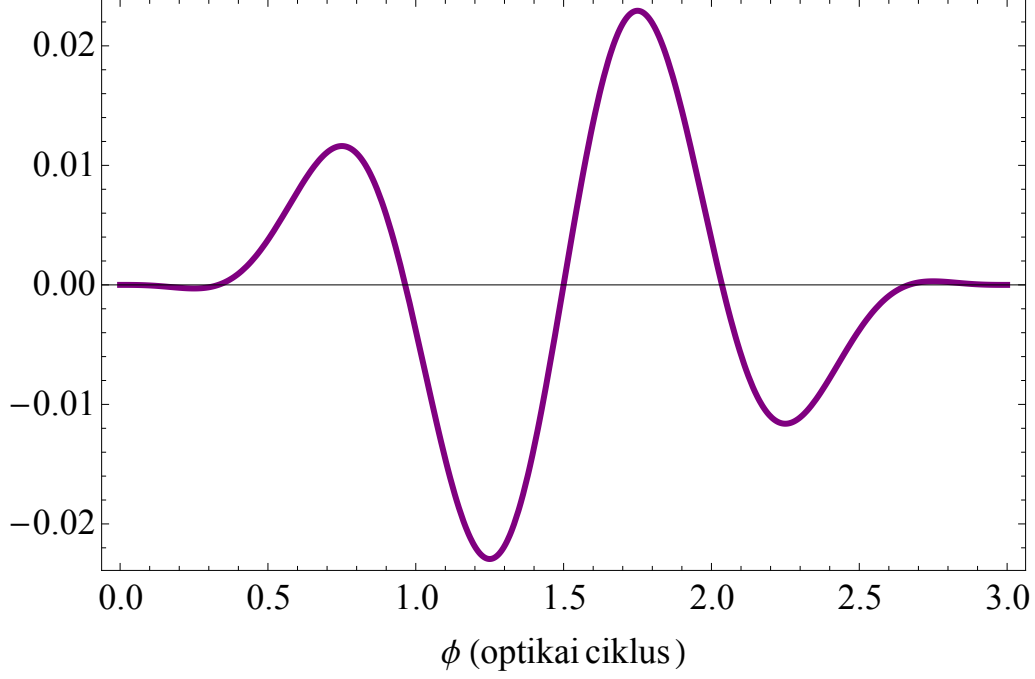
Ebben az esetben is három ismeretlenünk van az ionizáció ϕ fázisa illetve a kezdőimpulzusok a polarizáció és a terjedés irányában. Fejezzük ki most a (22) és (23) összefüggésekből p_x^0 -t és p_z^0 -t, és helyettesítsük be a (19) és (20) egyenletekbe.

$$p_x(t, \phi) = p_x^d \cos(\gamma(\phi, t)) + (c - p_z^d) \sin(\gamma(\phi, t)) \quad (25)$$

$$p_z(t, \phi) = c + (p_z^d - c) \cos(\gamma(\phi, t)) + p_x^d \sin(\gamma(\phi, t)) \quad (26)$$

$$\gamma(\phi, t) = \frac{E_0}{16c\omega} \left(6 \sin\left(\frac{2}{3}(\omega t + \phi)\right) - 8 \sin(\omega t + \phi) + 3 \sin\left(\frac{4}{3}(\omega t + \phi)\right) \right) \quad (27)$$

Így kaptunk egy egzakt és analitikusan származtatott kifejezést arra, hogy a detektoron mért impulzusok függvényében, hogyan fejlődik időben az elektron impulzusa az ionizációt követően egy 3-ciklusos szinusz négyzet burkolójú koszinuszos impulzussal való kölcsönhatás esetén. Három szabad paraméterünk van a megoldásokban, a következőkben azt vizsgáljuk, milyen fizikailag illetve matematikailag megalapozott közelítéssel élhetünk annak érdekében, hogy ezen három paraméter közül csak kettő legyen független.



4. ábra. A (24) kifejezés értéke a ϕ ionizációs fázis függvényében. Látható, hogy a maximális értéke $\sim 2,1 \times 10^{-2}$, ezért megalapozott a trigonometrikus függvényeket a hatványsoruk első tagjával közelíteni.

Ahhoz, hogy meghatározzuk a lézerimpulzus fázisát illetve az elektron kezdőimpulzusát az ionizáció pillanatában közelítéssel kell élnünk. Vizsgáljuk meg először a (24) képletet. Helyettesítsünk be a kísérletekben is használt lézerimpulzushoz tartozó paramétereket ($E_0 = 0.2$ a.u. illetve $\omega = \frac{2\pi}{100}$ a.u.). Ekkor, ahogyan a 4 ábrán látható, a (24) kifejezés a nulla körül oszcillál ϕ függvényében, így a trigonometrikus függvények közelíthetők a hatványsoruk elsőrendű tagjával. Ekkor az alábbi egyenletrendszert kapjuk:

$$p_x^d = p_x^0 + (c - p_z^0) \beta \quad (28)$$

$$p_z^d = p_z^0 + p_x^0 \beta. \quad (29)$$

Ezután nem vétünk nagy hibát akkor, ha a (28) képletben elhagyjuk p_z^0 -t a fénysebesség mellett. Kifejezve így a β -t a (28) egyenletből, majd behelyettesítve (29) egyenletbe p_z^0 -re az alábbi összefüggést kapjuk:

$$p_z^0 = \frac{p_x^0 (p_x^0 - p_x^d)}{c} + p_z^d. \quad (30)$$

Majd ezt a p_z^0 -t felhasználva oldjuk meg az eredeti (28) (29) egyenletrendszer, amelyben így már két ismeretlen van. . Ekkor az alábbi összetartozó megoldásokat kapjuk:

$$p_x^0 = p_x^d, \quad p_z^0 = p_z^d, \quad \beta = 0 \quad (31)$$

$$p_x^0 = 0, \quad p_z^0 = p_z^d, \quad \beta = \frac{p_x^d}{p_z^d - c} \quad (32)$$

$$p_x^0 = \frac{1}{2} \left(p_x^d + \sqrt{(p_x^d)^2 - 4cp_z^d} \right), \quad p_z^0 = 0, \quad \beta = \frac{1}{2c} \left(-p_x^d + \sqrt{(p_x^d)^2 - 4cp_z^d} \right) \quad (33)$$

$$p_x^0 = \frac{1}{2} \left(p_x^d - \sqrt{(p_x^d)^2 - 4cp_z^d} \right), \quad p_z^0 = 0, \quad \beta = \frac{1}{2c} \left(-p_x^d - \sqrt{(p_x^d)^2 - 4cp_z^d} \right) \quad (34)$$

Természetesen ezen képletek mindegyike közelítő összefüggés, és egy-egy határesetet ír le jól. Azonban mint, azt később a 7. fejezetben látni fogjuk megfelelően kombinálva ezen összefüggéseket igen jó közelítést tudunk tenni mind az elektron kezdőimpulzusára, mind arra, hogy a pillanatszerűnek tekintett optikai alagúteffektus bekövetkeztekor a lézertér milyen fázisban volt, tehát meg tudjuk határozni az ionizációs időt.

Megemlítjük még azt az esetet, amikor ugyancsak 3-ciklusos koszinuszos impulzussal hat kölcsön az elektron, de a mozgásegyenletben a vivő-burkoló fáziskülönbséget (φ) benne hagyjuk mint szabad paramétert. Ekkor is létezik analitikus megoldás:

$$p_x(t, \phi, \varphi) = p_x^0 \cos(F(t, \phi, \varphi)) + (c - p_z^0) \sin(F(t, \phi, \varphi)) \quad (35)$$

$$p_z(t, \phi, \varphi) = c + (-c + p_z^0) \cos(F(t, \phi, \varphi)) + p_x^0 \sin(F(t, \phi, \varphi)) \quad (36)$$

$$F(t, \phi, \varphi) = \frac{E_0}{16c\omega} \left(-6 \sin\left(\varphi + \frac{2\phi}{3}\right) + 8 \sin(\varphi + \phi) + \right. \\ \left. -3 \sin\left(\varphi + \frac{4\phi}{3}\right) - 8 \sin(\varphi + \phi + \omega t) \right. \\ \left. 6 \sin\left(\varphi + \frac{2}{3}(\omega t + \phi)\right) + 3 \sin\left(\varphi + \frac{4}{3}(\omega t + \phi)\right) \right). \quad (37)$$

A fent leírt eljárás bármilyen vivő-burkoló fáziskülönbség esetén megismételhető, a közelítések ezekben az esetekben is ugyan olyan jól működnek, mint az általunk tárgyalt esetben. Így tehát, hogy teljes legyen a kép, bármilyen vivő-burkoló fáziskülönbség esetén analitikus megoldását adtuk az optikai alagúteffektussal ionizálódott elektron mozgásegyenletének, és egy közelítő eljárást arra, hogy ezen klasszikus elmélet keretein belül, ésszerű közelítésekkel élve, mérhető mennyiségekből milyen következtetéseket tudunk tenni az ionizáció körülményeire.

3.4. A szakaszban bemutatott eredményeim összefoglalása

Ebben a szakaszban megmutattam, hogy a klasszikus Newton-Lorentz-egyenleteken keresztül analitikusan kezelhető marad egy olyan fontos folyamat leírása, mint az atomba kötött elektron optikai alagúteffektussal történő ionizációja. A manapság használt lézerintenzitások esetén már a lézertér mágneses része is szignifikánsan befolyásolhatja az elektron dinamikáját, ezért a mozgásegyenletekben ezt is figyelembe vettem. Megmutattam, hogy mind síkhullám (lassan változó burkoló) mind szinusz négyzet burkolójú

lézerimpulzus esetén a mozgásegyenlet analitikusan megoldható. Végül vizsgáltam a 3-ciklusos szinusz négyzet burkolójú lézerimpulzus által ionizált elektron mozgásegyenletét és annak megoldását. Láttuk, hogy a vivő-burkoló fáziskülönbséget, mint független paramétert tartalmazó lézerimpulzus esetén a mozgásegyenlet analitikus megoldhatósága megmarad. Végül azt is láttuk, hogy a vivő-burkoló fáziskülönbséggel nem rendelkező lézerimpulzussal kölcsönható elektron mozgásegyenletének megoldásából közelítő összefüggéseket lehet levezetni, melyek mérhető mennyiségekből segítenek visszakövetkeztetni az optikai alagúteffektus körülményeire. Ezek használhatóságáról a 7. fejezetben ejtünk még szót.

4. Intenzív lézertérrel kölcsönható atomi elektron kvantum dinamikája

Amennyiben a bejövő lézertér intenzitása kisebb mint $10^{13} \frac{W}{cm^2}$ a perturbációszámítás jól leírja az atomi elektron kvantum dinamikáját. Azonban ezen intenzitás tartomány felett, ahogy ebben a dolgozatban is fel van tételezve, a perturbációszámítás már nem alkalmazható. Ez azt jelenti, hogy nagy intenzitások esetén nem-perturbatív megközelítés szükséges az atomi elektron időfüggő Schrödinger-egyenletének megoldásához, ami azonban már nem kezelhető analitikusan. A legtöbb szemi-analitikus nem-perturbatív megközelítés jól működik a lézerintenzitás egy bizonyos tartományára, azonban ezen kívül már nem használhatók kellő pontossággal. Egy természetesen adódó alternatíva a Schrödinger-egyenlet direkt integrálása, amely az intenzitás és frekvencia teljes tartományára alkalmazható. Ezen metódust minden előnye ellenére csak az utóbbi másfél évtizedben használják komolyabban, ugyanis nagy az erőforrásigénye. Az erős lézertérben a hullámfüggvény nagy sebességgel terjed, így a numerikus integrálást nagyobb térrészre és kisebb lépésközzel kell végrehajtani, ami jelentősen megnöveli a szimuláció futási idejét. Ahhoz, hogy elkerüljük a nagy számítási időt közelítésekkel kell élnünk. Ezen közelítések két kategóriába sorolhatók: az egydimenziós és a megközelítőleg háromdimenziós integrálás[3].

4.1. Az egydimenziós Schrödinger-egyenlet megoldása

A legegyszerűbb útja a számítási idő redukálásának, ha csökkentjük a rendszer dimenzióját. A legnagyobb hátránya az ilyen közelítéseknek az, hogy nem kapunk információt a transzverzális viselkedésről, amelyek fontos szerepet játszhatnak a lézertér és atom kölcsönhatása során, gondoljunk csak a lézertér mágneses részére vagy arra, hogy egydimenziós közelítésnél nincs értelme cirkulárisan polarizált lézerteret használnunk. Egy dimenzióban a Coulomb-potenciál szingularitásának hatása is felerősödik a valós háromdimenziós leíráshoz képest, illetve az időfejlésztés során numerikus problémákat is okozhat. Ezért általában valamilyen modell potenciállal helyettesítik a Coulomb-potenciált, hogy elkerüljék a szingularitásból származó ilyenfajta hibákat. Mindezek ellenére az egydimenziósra redukált Schrödinger-egyenlet mégis effektíven használható, hiszen a paraméterek széles tartományára relatíve rövid futási időt produkál, és a számítási eredmények pedig jó összhangban vannak azon kísérleti eredményekkel, amikor a mozgás valóban egy dimenzióban megy végbe, mint például az általunk tárgyalt esetben, amikor lineárisan polarizált ultrarövid lézerimpulzussal hat kölcsön egy atom.

Vegyük a lézertérrel kölcsönható elektron egydimenziós Schrödinger-egyenletét koordináta reprezentációban

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = [H_0 + H_{int}] \Psi(x,t) \quad (38)$$

ahol H_0 az időfüggetlen Hamilton-operátor, amely koordináta reprezentációban

$$H_0 = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0(x) \quad (39)$$

ahol V_0 az atomi potenciál. A H_{int} kölcsönhatási Hamilton-operátor csatolja az elektront a lézertérhez. A kölcsönhatási tagnak analitikusan megvan az a tulajdonsága, hogy az atomi potenciálnál Coulomb-mértéket választva a kölcsönhatási tagot többféle mértékben írhatjuk fel. A két legelterjedtebb mértékválasztás a hosszmérték illetve a sebességmérték. A H_{int} hosszmértékben

$$H_{int}^L = E(t) x \quad (40)$$

ahol $E(t)$ a lézertér elektromos térerőssége, és sebességmértékben

$$H_{int}^V = -iA(t) \frac{\partial}{\partial x} \quad (41)$$

ahol $A(t)$ a lézertér vektorpotenciálja. Megjegyezzük, hogy numerikusan nincs meg a mértékválasztás szabadsága, ugyanis attól függően, hogy az iontörzstől milyen távoli folyamatokat vizsgáljuk eltérő pontosságot tapasztalunk a két mérték esetén. Ugyanis a hosszmérték pontosabb eredményt ad az iontörzshöz közel, amikor a lézertér-elektron kölcsönhatás viszonylag gyenge a Coulomb-potenciál-elektron kölcsönhatási taghoz képest. A magtól távolabb pedig a sebességmérték alkalmazható pontosabban. Mivel a mi esetünkben a maghoz közeli folyamatokat vizsgálunk, ezért természetesen hosszmértéket alkalmazunk.

A numerikus szimulációkhoz írjuk át a (38) differenciálegyenletet differenciaegyenletté

$$\frac{\Psi_{i,j+1} - \Psi_{i,j}}{\Delta t} = \frac{i}{2} \left[\frac{\Psi_{i+1,j} - 2\Psi_{i,j} + \Psi_{i-1,j}}{(\Delta x)^2} - iV_{ij} \right] \Psi_{i,j} \quad (42)$$

ahol Δt az idő lépésköz Δx a térbeli lépésköz i a térbeli pontokat indexeli minden j -edik időlépésben. Ebben az esetben V_{ij} jelöli az atomi és a lézertér potenciáljának összegét. A (42) egyenlettel a legnagyobb probléma, hogy nem unitér. Hogy ezt kiküszöböljük integráljuk formálisan a (38) időfüggő Schrödinger-egyenletet, ekkor az alábbi összefüggést kapjuk:

$$\Psi(x, t) = e^{-iHt} \Psi(x, t_0) \quad (43)$$

ahol H a vizsgált rendszer Hamilton-operátora. Az fenti kifejezést közelíthetjük az alábbi módon:

$$\Psi_{i,j+1} = (1 - iH\Delta t) \Psi_{i,j}. \quad (44)$$

Másrésről azonban a (42) nem stabil egyenletrendszer átalakíthatjuk a következő stabil implicit rendszerré:

$$\Psi_{i,j+1} = (1 + iH\Delta t)^{-1} \Psi_{i,j}. \quad (45)$$

Mind a (44) és (45) kifejezés Δt -ben első rendben pontos, de egyik időfejllesztő operátor sem unitér. Azonban, ha a Cayley-formulát alkalmazzuk az e^{-iHt} evolúciós operátor véges differencia módszerrel való közelítéséhez, akkor az alábbi időben másodrendben pontos és unitér időfejllesztő operátort kapjuk:

$$e^{-iHt} \simeq \left[\frac{1 - iH\frac{\Delta t}{2}}{1 + iH\frac{\Delta t}{2}} \right]. \quad (46)$$

Ekkor a numerikus probléma megoldásához a

$$\Psi_{i,j+1} = \left[\frac{1 - iH\frac{\Delta t}{2}}{1 + iH\frac{\Delta t}{2}} \right] \Psi_{i,j} \quad (47)$$

lineáris egyenletrendszerrel kell megoldanunk minden egyes Δt időlépésre. Az időfüggő Schrödinger-egyenlet fenti (47) közelítését nevezi a szakirodalom Crank-Nicolson-módszernek [8].

4.2. Az alkalmazott modell potenciálok

Ebben az alszakaszban áttekintjük, hogy a hidrogén atom kvantummechanikai szimulációi során milyen modell potenciált használtunk az egydimenziós atom modellezésére.

Az első ilyen potenciál a Dirac-delta potenciál, amely az alábbi alakú.

$$V_D(x) = -u_0\delta(x - a) \quad (48)$$

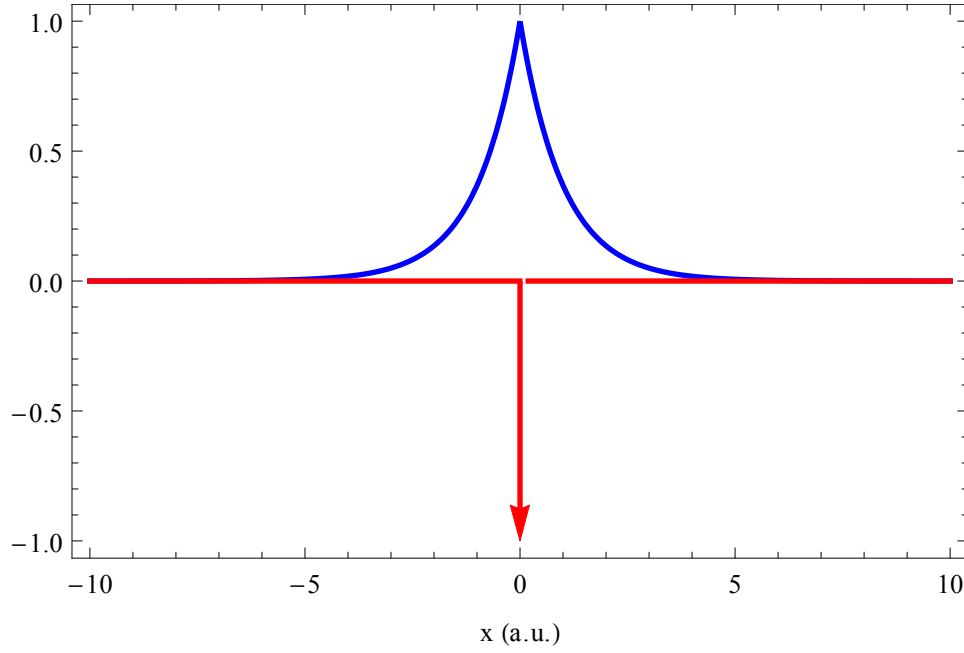
ahol u_0 választható paraméter, és a a iontörzs térbeli koordinátája. Ez a modell potenciál egyetlen kötött állapottal rendelkezik (5. ábra).

$$\Psi(x) = \sqrt{u_0}e^{-u_0|x-a|} \quad (49)$$

A kötött állapot energiája

$$E = -\frac{u_0^2}{2} \quad (50)$$

tehát ha az $u_0 = 1$ paramétert alkalmazzuk, akkor a kötött állapot energiája éppen a hidrogén atom alapállapot energiája. A Dirac-delta potenciál nagy előnye, hogy analitikusan is kezelhető, így a numerikus számítási eredmények összevethetők az analitikus eredményekkel ellenőrzés céljából. Másik tulajdonsága, hogy a lézertér nem torzítja az atomi potenciált, így az alagúteffektus mindig fellép, más modell potenciál nem rendelkezik ezzel a tulajdonsággal.



5. ábra. A Dirac-delta modell potenciál (piros görbe) és a hozzá tartozó (49) képlettel megadott analitikus kötött állapot (kék görbe). Jól látható a Dirac-delta szingularitása miatt jelentkező csúcsa az origóban, amely a tényleges hidrogén atomba kötött elektron alapállapotra is jellemző.

A másik általunk használt modell potenciál az egydimenziós soft-Coulomb-potenciál, az erőstér fizikában ezt a modell potenciált alkalmazzák a leggyakrabban.

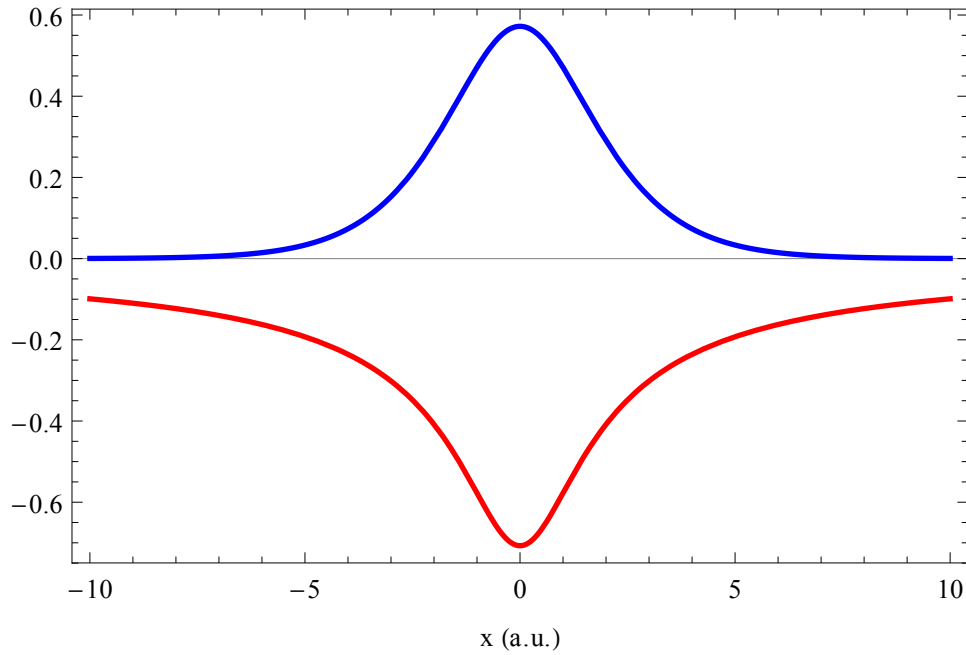
$$V_C(x) = -\frac{q}{\sqrt{x^2 + a^2}} \quad (51)$$

Előnye, hogy nem tartalmazza a valódi Coulomb-potenciálban lévő szingularitást, amely a numerikus számítások során nehézséget jelentene. Másik nagy előnye, hogy magában foglalja a Coulomb-potenciál összes fő jellemvonását. Reprodukálható belőle, a hidrogén atom végtelen sok kötött állapota (Rydberg-sorozat) valamint a kontinuum állapotban a Coulomb-torzítás. Amennyiben az a simító paramétert $\sqrt{2}$ -nek választjuk visszakapjuk az alapállapot energiáinak értékeit a hidrogén atom alapállapot energiájához, azaz $E_1 = -\frac{1}{2}$, és az ehhez az energiához tartozó alapállapot:

$$\Psi(x) = N e^{-\sqrt{x^2+2}} \left(1 + \sqrt{x^2+2}\right) \quad (52)$$

ahol N a normálási tényező. A szimulációkban ezt az analitikus kötött állapotot tekintjük kiindulási állapotnak. Megjegyezzük, hogy az alapállapot energiáinak egyezése nem garantálja, hogy a gerjesztett állapotok energiája is megegyezik a valódi Coulomb-potenciál gerjesztett állapotainak energiájával. [9] A 6. ábrán látható a soft-Coulomb-potenciállal modellezett egydimenziós hidrogén atom kötött alapállapota, melyet kiindulási állapotnak vettünk a numerikus szimulációk során. Összehasonlítva a 5. és 6. ábrát látható,

hogy a két alkalmazott potenciál jelentősen eltér egymástól már az alapállapotban is.



6. ábra. A soft-Coulomb potenciál (piros görbe) és a hozzá tartozó analitikus kötött állapot (kék görbe), amely a (52) képlettel adható meg.

Láthatóan mindkét fent említett modell potenciálnak megvan a maga fizikai relevanciája. Ezen oknál fogva természetesnek adódik az ötlet, hogy az előzőekben tárgyalt két modell potenciál valamilyen súllyal vett összegéből egy új modell potenciált állítsunk elő, amely mind a Dirac-delta mind a soft-Coulomb modell potenciál jó tulajdonságát magába foglalja, és jobb egydimenziós modelljének bizonyul a valódi háromdimenziós Coulomb-potenciálnak. Így az általunk alkalmazott modell potenciál általános alakja:

$$V_K(x) = C_1 V_D(x) + C_2 V_C(x) \quad (53)$$

ahol C_1 és C_2 az egyes modell potenciálok súlya, melyeket úgy kell beállítani, hogy az alapállapot energiája a modellezni kívánt hidrogén atom alapállapot energiája legyen. Ezzel a modell potenciállal bővebben a 6. szakaszban foglalkozunk.

5. A klasszikus és a kvantumos dinamika összehasonlítása

Ebben a szakaszban összevetjük a dolgozat keretein belül tárgyalt optikai alagúteffekttussal történő ionizáció klasszikus és kvantumos dinamikáját. Ezt szemléletes módon tehetjük meg, bevezetjük a fázistéren értelmezett sűrűségfüggvény kvantummechanikai analógját, a Wigner-függvényt.

5.1. A Wigner-függvény és momentumai

A klasszikus statisztikus mechanikában a Boltzmann-függvénnyel jellemezzük a fizikai rendszert a fázistéren. Ha $f_B(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ a Boltzmann-függvény, akkor annak a valószínűsége, hogy a részecske koordinátája az $\mathbf{r}$ körüli $d^3\mathbf{r}$ tartományba és impulzusa a $\mathbf{p}$ körüli $d^3\mathbf{p}$ tartományba esik $f_B(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p}$. Ezen függvény analógjára vezette be Wigner Jenő 1932-ben [10] a később róla elnevezett eloszlásfüggvényt. A Wigner-függvény $\hat{\rho}$ sűrűségoperátorral jellemzett rendszerhez tartozó, általunk is használt egydimenziós alakja SI-egységrendszerben

$$W(x, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp\left(2\frac{i}{\hbar}p\xi\right) \langle x - \xi | \hat{\rho} | x + \xi \rangle. \quad (54)$$

Amennyiben az állapot tiszta állapot, esetünkben erről van szó, akkor a fenti (54) képlet a hullámfüggvény koordináta reprezentációbeli alakjával kifejezve az alábbi alakú [11].

$$W(x, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \exp\left(2\frac{i}{\hbar}p\xi\right) \Psi^*(x + \xi, t) \Psi(x - \xi, t) \quad (55)$$

Ahhoz, hogy a klasszikus fázistéren tudjuk értelmezni a Wigner-függvényt, illetve az általa leírt rendszer viselkedését be kell vezessük a Wigner-függvény úgynevezett momentumait.

$$P_n(x, t) = \int p^n W(x, p, t) dp \quad (56)$$

Ez a kifejezés, amennyiben $n = 0$, könnyen ellenőrizhető módon azzal a valószínűségi sűrűséggel egyelő, hogy a részecskét a t időpillanatban az x koordinátájú helyen detektálom.

$$P_0(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 \quad (57)$$

A P_1 pedig az alábbi alakba írható a Wigner-függvény definíciója alapján

$$P_1(x, t) = \frac{i\hbar}{2} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi^*(x, t) \right) \Psi(x, t) - \Psi^*(x, t) \left(\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \right) \right] \quad (58)$$

amely mennyiség az elektron m tömegétől eltekintve éppen a $\Psi(x, t)$ hullámfüggvénnyel jellemzett részecske valószínűségi áramsűrűsége. Intuitív módon előállíthatunk a 1. és 0. momentum hányadosaként egy olyan mennyiséget, aminek már impulzus a mértékegysége:

$$\bar{p}(x, t) = \frac{P_1(x, t)}{P_0(x, t)} \quad (59)$$

Ezt a mennyiséget tekinthetjük a $\Psi(x, t)$ hullámfüggvénnyel jellemzett részecske helytől függő impulzusának. Könnyen megmutatható, hogy ez $\bar{p}(x, t)$ a mennyiség megegyezik az ún. „quantum momentum” függvénnyel, amellyel kvantitatíve jellemezni tudjuk a kvantumos részecske viselkedését a fázistéren. Ennek kifejezését tovább egyszerűsíthetjük, ha a hullámfüggvényt felvesszük

$$\Psi(x, t) = R(x, t) e^{i\varphi(x, t)} \quad (60)$$

Euler-alakban. Ekkor egyszerű számítással igazolható, hogy a kvantum momentum függvény nem más, mint a hullámfüggvény $\varphi(x, t)$ fázisszögének koordináta szerinti deriváltja.

$$\bar{p}(x, t) = \hbar \frac{\partial}{\partial x} \varphi(x, t) \quad (61)$$

Ezzel a mennyiséggel, mint az látni fogjuk, már össze tudjuk vetni a klasszikus elektron dinamikáját a kvantummechanikailag leírt elektron dinamikájával a fázistéren.

5.2. A klasszikus dinamika összehasonlítása a kvantumos dinamikával Dirac-delta modell potenciál esetén

Most, hogy minden eszköz a rendelkezésünkre áll, hasonlítsuk össze a fázistéren az elektron klasszikus illetve egydimenziós kvantumos dinamikáját. A kvantum momentum illetve Wigner-függvényt két esetben vetjük össze az elektron klasszikus trajektóriáival, akkor amikor a klasszikus trajektória számításakor elhanyagoljuk az atomi Coulomb-potenciált, és amikor nem.

Nézzük azt az esetet, amikor a modell potenciál a (48) képlettel megadott Dirac-delta potenciál. Ekkor a potenciálgáton átjutott elektron kezdő pozícióját könnyen felírhatjuk mint az idő függvényét.

$$x_0(t) = -\frac{I_p}{E(t)} \quad (62)$$

ahol I_p az atom ionizációs potenciálja, ez hidrogén esetén $\frac{1}{2}$ és $E(t)$ pedig az oszcilláló lézertér. Az általunk vizsgált esetekben $E(t)$ megegyezik a (11) képlettel leírt impulzussal. A klasszikus mozgásegyenletek mind analitikus mind numerikus megoldásánál a fenti (62) összefüggést tekintjük a kezdeti pozíciónak. A kezdeti impulzus pedig a kvantum momentum függvény értéke az $x_0(t_0)$ helyen a t_0 időpillanatban. Ahhoz, hogy megkap-

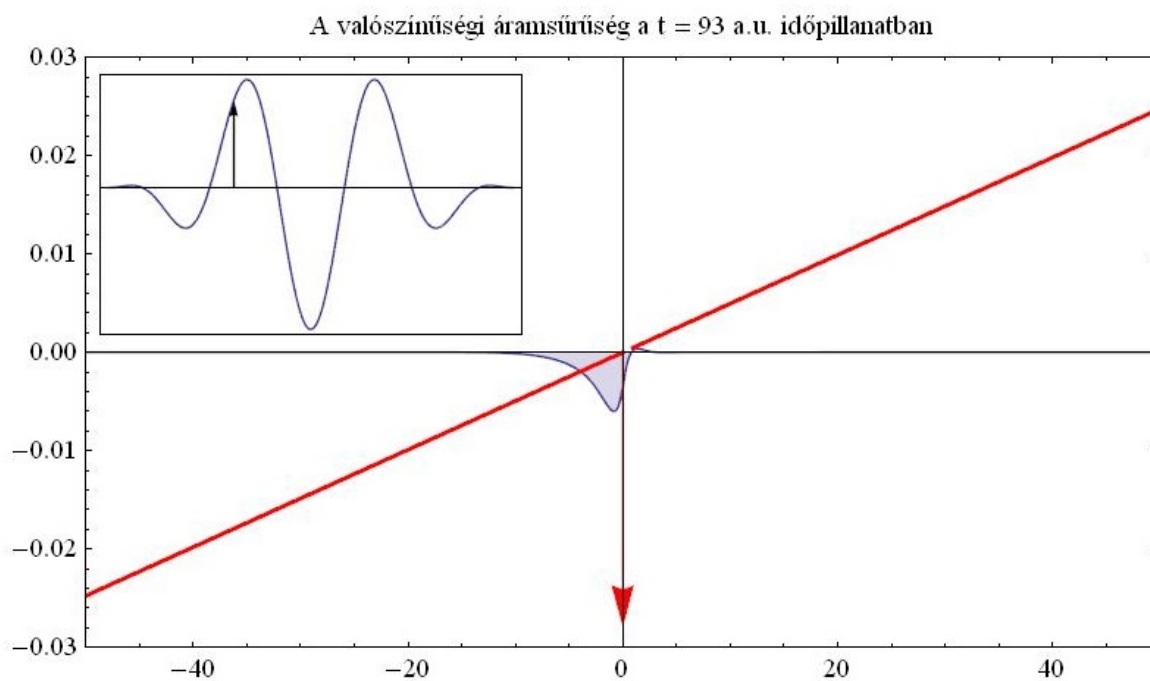
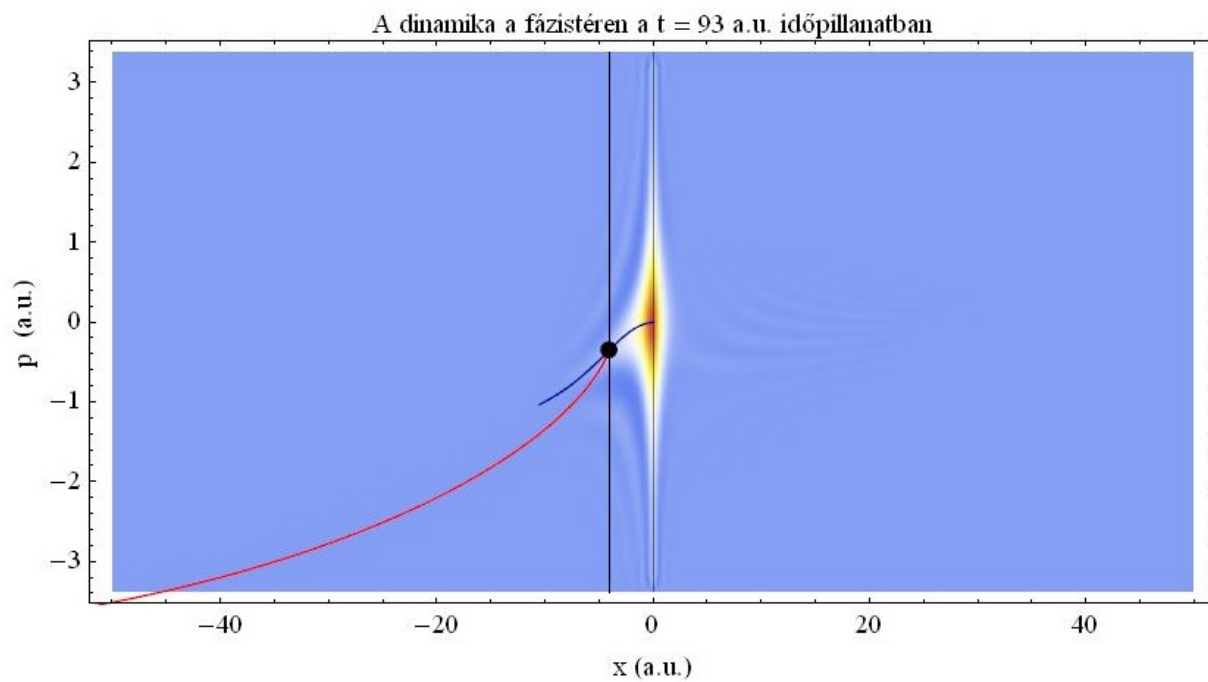
juk a klasszikus fázistéren az elektron által befutott trajektóriát, szükségünk van a (19) analitikus kifejezésen kívül az elektron hely idő függvényére, melyet az alábbi csatolt differenciálegyenlet rendszer numerikus megoldásából kaphatunk meg.

$$\ddot{x}(t) = -E(t) \left(1 - \frac{\dot{z}(t)}{c}\right) \quad (63)$$

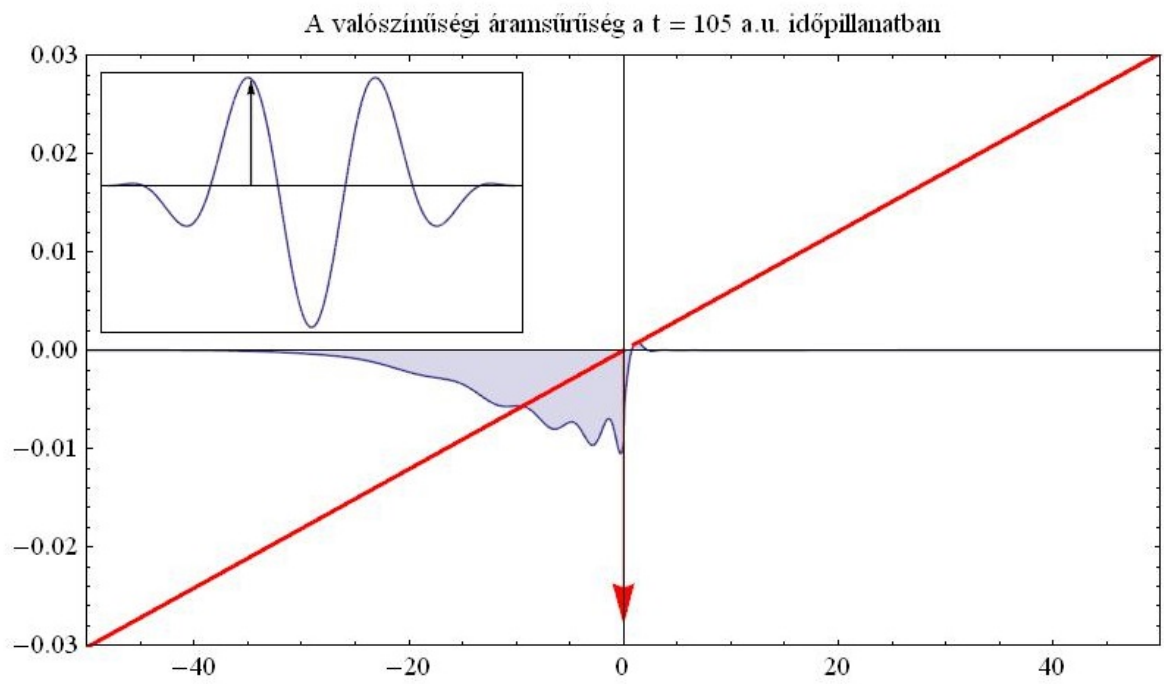
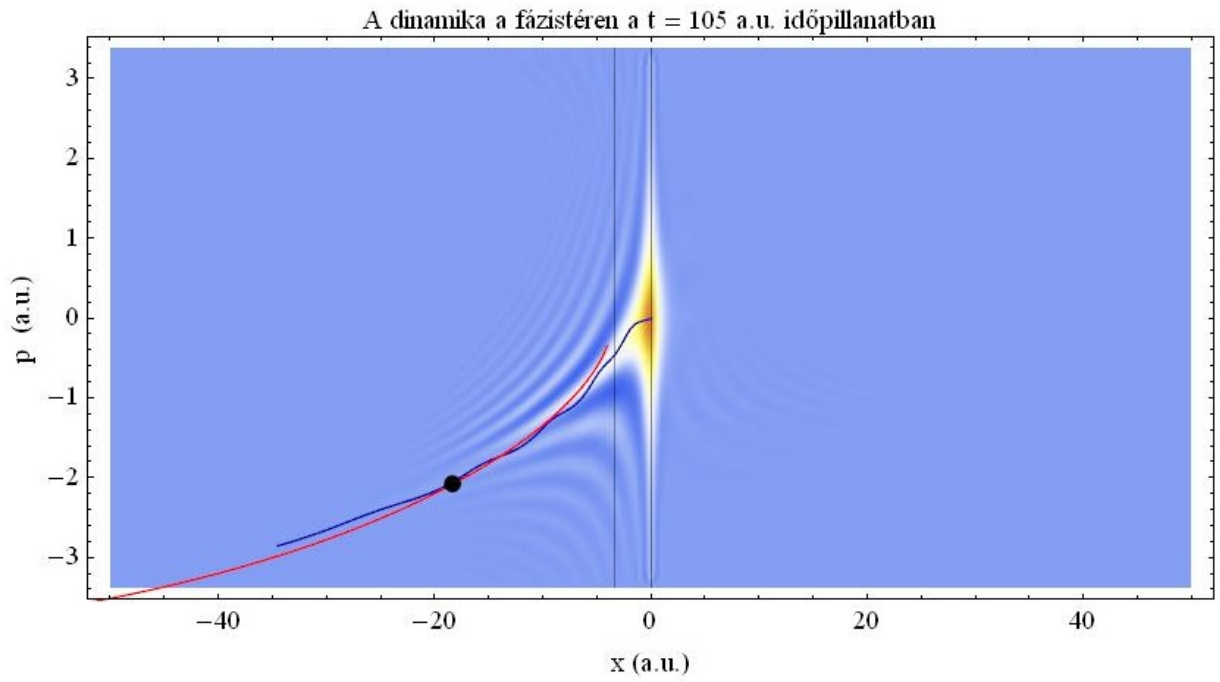
$$\ddot{z}(t) = -\frac{E(t)}{c} \dot{x}(t) \quad (64)$$

ahol $E(t)$ a már említett 3-ciklusos impulzus, mely amplitúdójának numerikus értéke ebben az esetben $E_0 = 0.2$, amely természetesen megegyezik a Schrödinger-egyenlet numerikus megoldásakor használt értékkel. A kezdeti feltételeket pedig már említett módon a (62) kifejezés és a kvantum momentum függvény ezen a helyen felvett értéke szolgáltatja, azaz úgy tekintjük, hogy a klasszikus mozgás az alagút „kijáratától” indul, de nem az általában feltételezett 0 impulzussal, hanem az kvantum momentum függvényből számolt kezdő impulzussal. Olyan ionizációs időket vizsgálunk, amikor a modell potenciál és a bejövő lézertér összegéből képzett potenciálgát elég vékony ahhoz, hogy számottevő alagutazás megtörténjen. Ilyen esetek tipikusan a maximumok környékén következhetnek be, amikor a lézertér potenciálja a legmeredekebb. Olyan klasszikus trajektóriákat vizsgálunk csak, amin haladva az ionizálódott elektron azon az oldalon éri el a detektort, amelyik oldalon átjutott a potenciálgáton, hiszen a klasszikus modell keretein belül az esetleges rekombináció vagy szóródás már nem tárgyalható. Vegyünk tehát, egy olyan ionizációs időt, amely megfelel a fenti feltételeknek és vessük össze a hidrogénatomból ionizálódott elektron klasszikus trajektóriáját a kvantum momentum függvényével valamint a Wigner-függvényével. Ábrázoltuk a Wigner-függvényt (világoskéktől pirosig terjedő színskálán), a kvantum momentum függvényt (sötétkék görbe) minden ábrán feltüntetett időpillanatban. Továbbá látható egy adott időpillanatban ionizálódott elektron klasszikus trajektóriája (piros görbe) és az elektron (fekete pont) mozgása ezen a trajektórián. A függőleges fekete vonal az atom középpontját és a mindig aktuális alagút kijáratot szemlélteti. Az alsó ábrákon az áramsűrűség (kék görbe) valamint a potenciál látható. Szemléltetésképpen feltüntettük, hogy a lézerimpulzus mely részével hat kölcsön az atom. (7-9. ábra) Látható, hogy az alagúteffektussal ionizálódott elektron klasszikus trajektóriájához közelít az elektron kvantum momentum függvénye, ahogy az elektron halad a trajektórián. Továbbá, mindkét görbe jól illeszkedik a Wigner-függvény fő hullámvonulataihoz. Ez azt mutatja, hogy egyrészt a kvantum momentum függvény valóban személetes és helyes leírását adja a kvantumos folyamatnak, másrészt a kvantummechanikai leírás és a klasszikus dinamika jól egyezik az alagutazás utáni folyamat során. Ahhoz, hogy meg tudjuk állapítani, hogy a koordináták mely tartományára tekinthető fizikailag reálisnak a kvantum momentum függvény, ábrázoltuk a (58) képlettel megadott valószínűségi áramsűrűséget is. Ahol utóbbinak már nincs számottevő értéke, ott a kvantum momentum függvény is

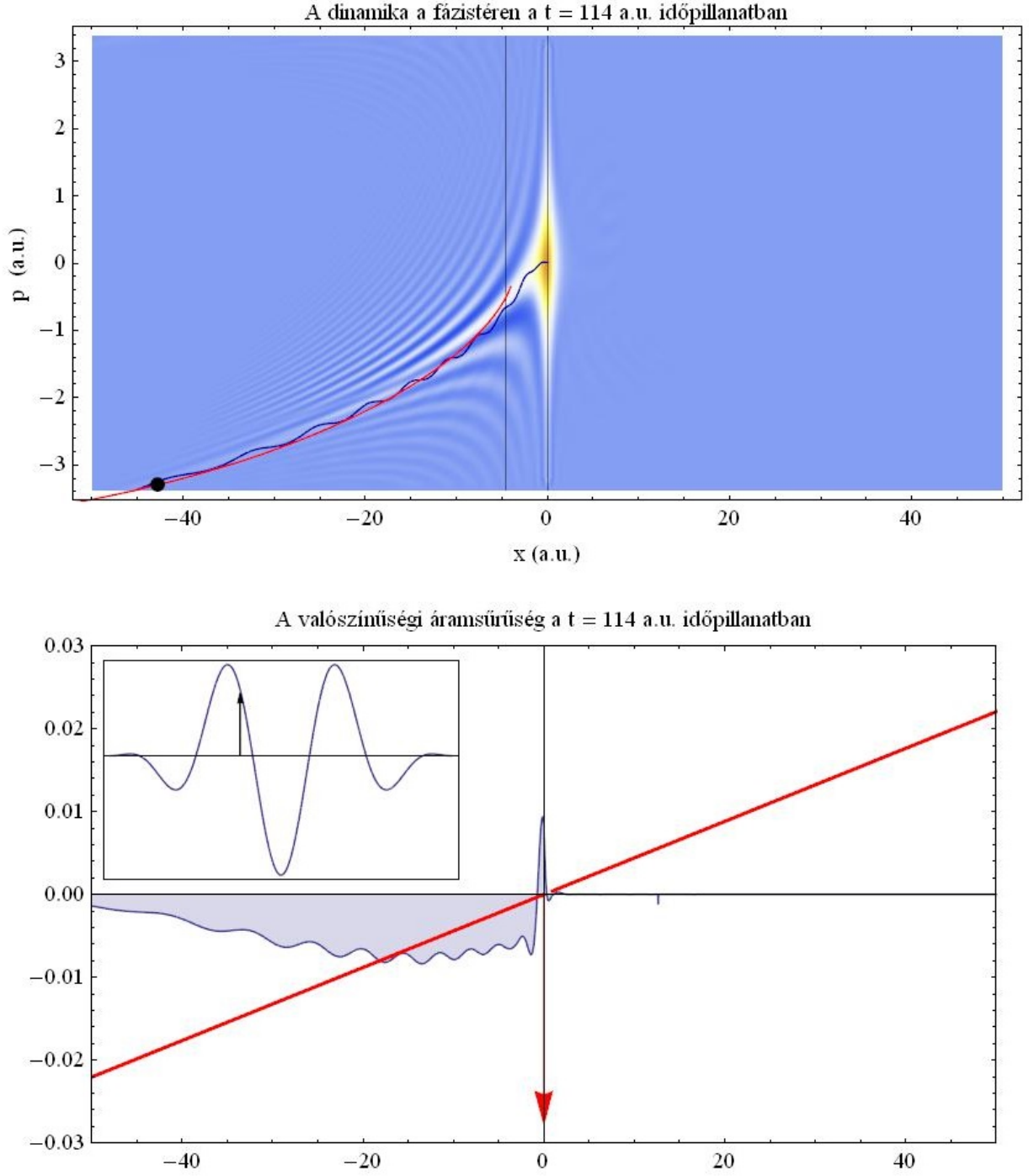
jelentős numerikus hibával terhelt és nem releváns.



7. ábra. A fázistér és a valószínűségi áramsűrűség a $t = 93$ atomi időpillanatban.



8. ábra. A fázistér és a valószínűségi áramsűrűség a $t = 105$ atomi időpillanatban.



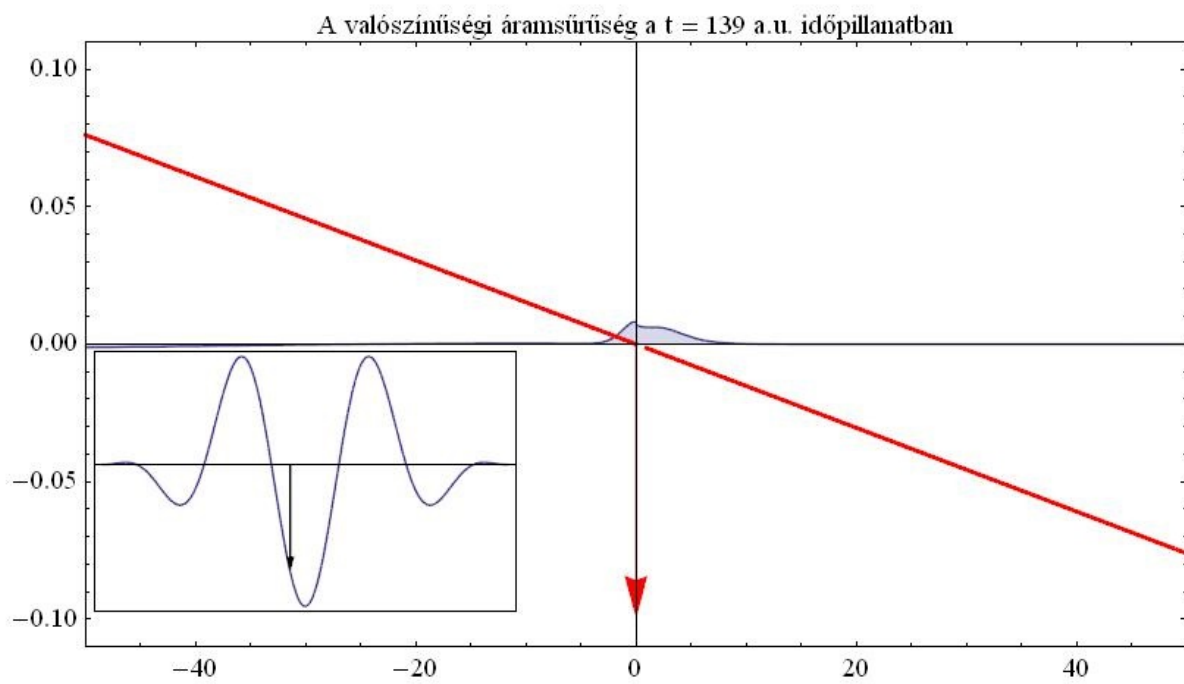
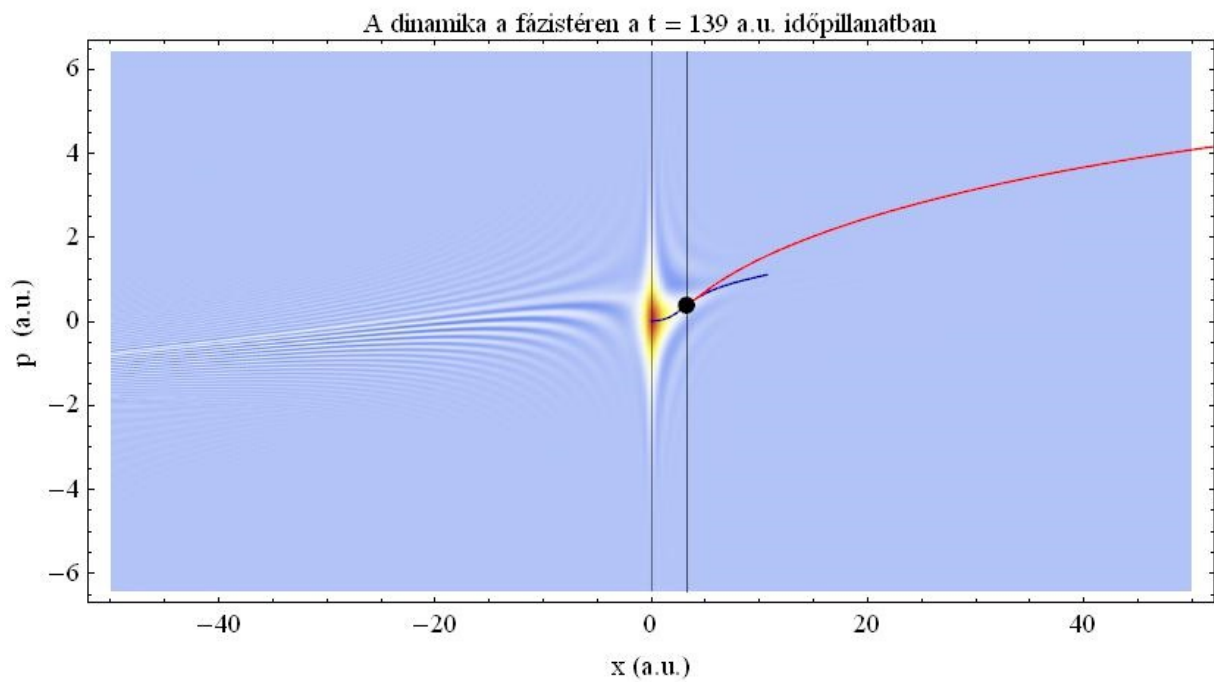
9. ábra. A fázistér és a valószínűségi áramsűrűség a $t = 114$ atomi időpillanatban.

Most vizsgáljuk azt az esetet, amikor a klasszikus számolásokba bele vesszük az atommag Coulomb-potenciálját is, ekkor már az impulzust sem kaphatjuk meg analitikusan. A megoldandó mozgásegyenlet az alábbi:

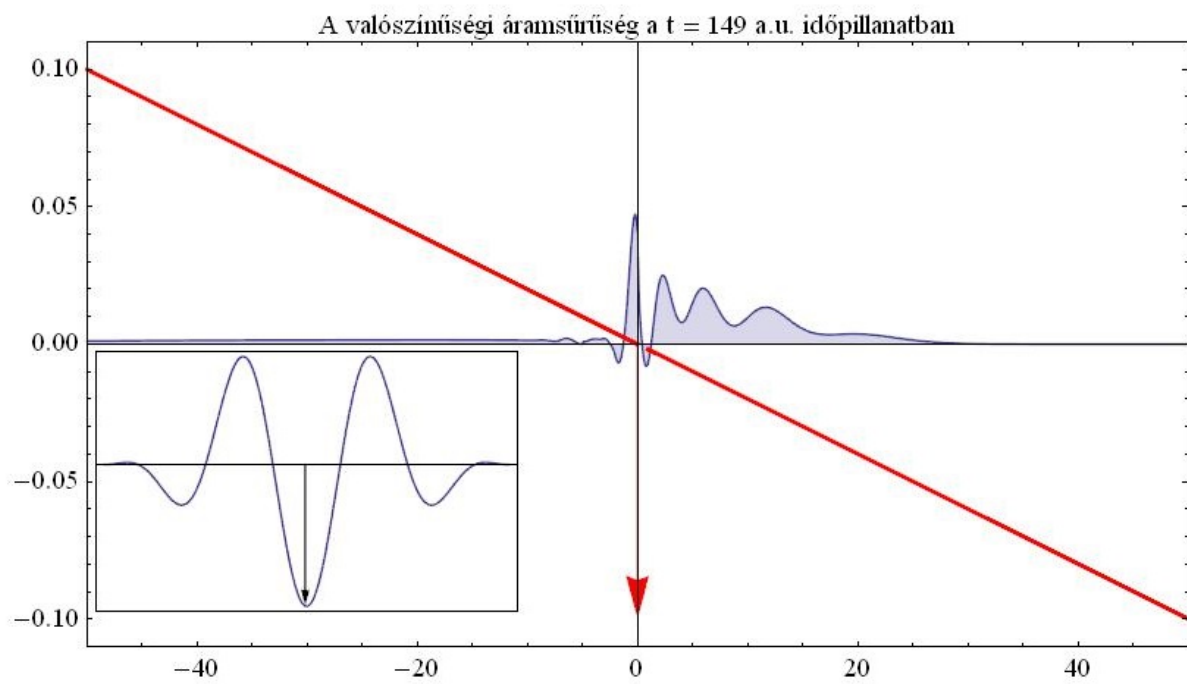
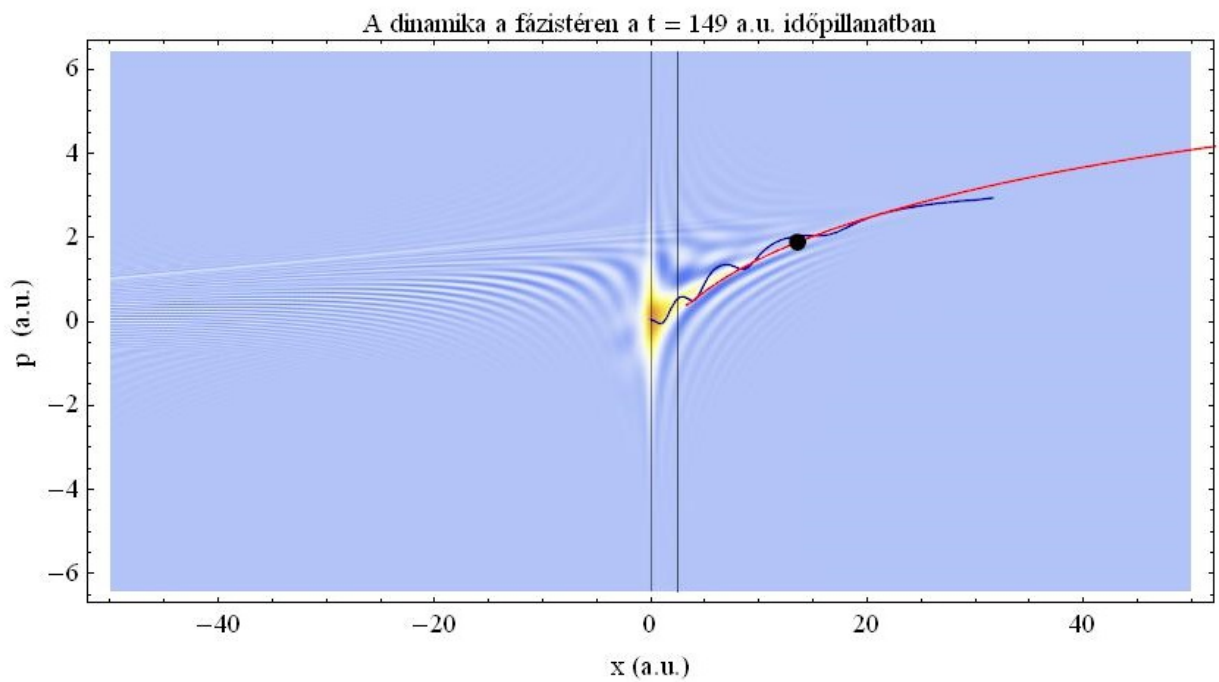
$$\ddot{x}(t) = -E(t) \left(1 - \frac{\dot{z}(t)}{c} \right) - \frac{x(t)}{(x(t)^2 + z(t)^2)^{\frac{3}{2}}} \quad (65)$$

$$\ddot{z}(t) = -\frac{E(t)}{c}\dot{x}(t) - \frac{z(t)}{(x(t)^2 + z(t)^2)^{\frac{3}{2}}} \quad (66)$$

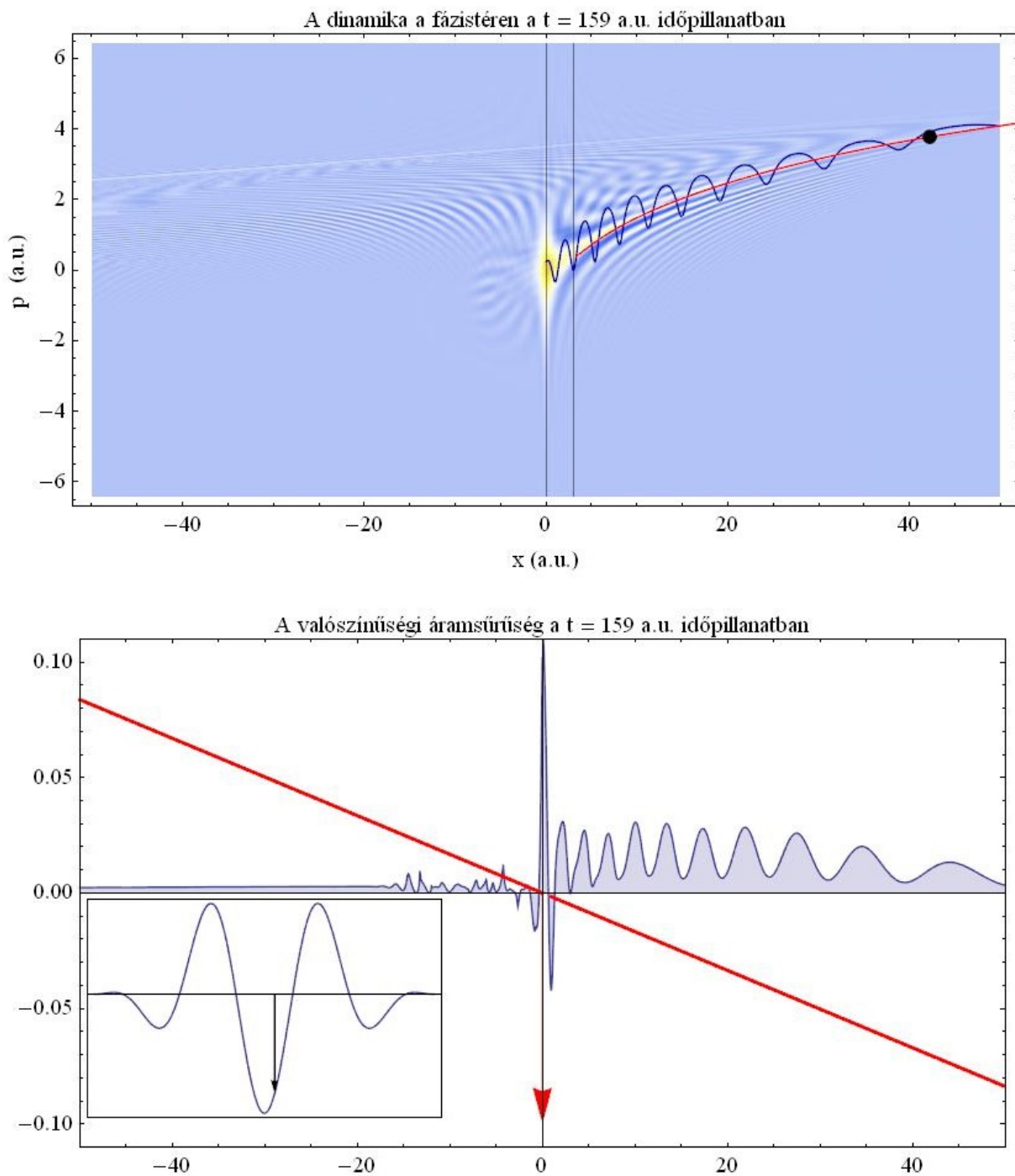
ahol kezdeti feltételnek ismételten a (62) képlettel megadott kezdőpozíciót és a kvantum momentum függvény hozzá tartozó értékét választjuk. A már említett feltételeket figyelembe véve az ionizációs időkre és a vizsgált trajektóriákra ábrázoljuk ismételten a kvantum momentum függvényt, a Wigner-függvényt és a klasszikus trajektóriát a fázistéren. (10-12. ábra) Látható, hogy ebben az esetben is a kvantummomentum függvény közelíti a klasszikus trajektóriát, ahogy az elektron egyre távolodik az iontörzstől, és az is észrevehető, hogy az eltérés kisebb, mint amikor a klasszikus mozgásegyenletet Coulomb-potenciál nélkül oldottuk meg, bár akkor sem volt jelentős.



10. ábra. A fázistér és a valószínűségi áramsűrűség a $t = 139$ atomi időpillanatban.



11. ábra. A fázistér és a valószínűségi áramsűrűség a $t = 149$ atomi időpillanatban.



12. ábra. A fázistér és a valószínűségi áramsűrűség a $t = 159$ atomi időpillanatban.

Ez alapján azt a következtetést tudjuk levonni, hogy az ionizálódott elektron klasszikus dinamikája - Coulomb-potenciállal vagy anélkül - jól közelíti a kvantum dinamikát. Ez lehet annak az alapja, hogy az erős lézertérrel kölcsönható atomi rendszerek esetén tapasztalható bizonyos effektusokra igen jól működik a klasszikus közelítés, valamit azt is kijelenthetjük, hogy az atomi Coulomb-tér elhanyagolása nem jelent jelentős változást a trajektória és a kvantum momentum függvény egyezésében, tehát az általunk a 3. szá-

kaszban mutatott analitikus összefüggések ezek szerint jól használhatóak. Ez pedig olyan elméleteket igazol, amelyek az ionizációt követően elhanyagolják az iontörzs Coulomb-potenciáljának hatását. Gondoljunk csak a magasrendű harmonikus keltés három lépéses modelljére, ahol szintén egy ilyen közelítéssel szokás élni. Ugyanakkor, a klasszikus trajektória és a kvantum momentum függvény görbéi észrevehetően jobban egyeztek abban az esetben amikor a Coulomb-potenciált is figyelembe vettük a klasszikus mozgásegyenletekben (10-12. ábra), mint abban az esetben amikor ezt a kölcsönhatást elhanyagoltuk (7-9. ábra).

5.3. A klasszikus dinamika összehasonlítása a kvantumos dinamikával soft-Coulomb modell potenciál esetén

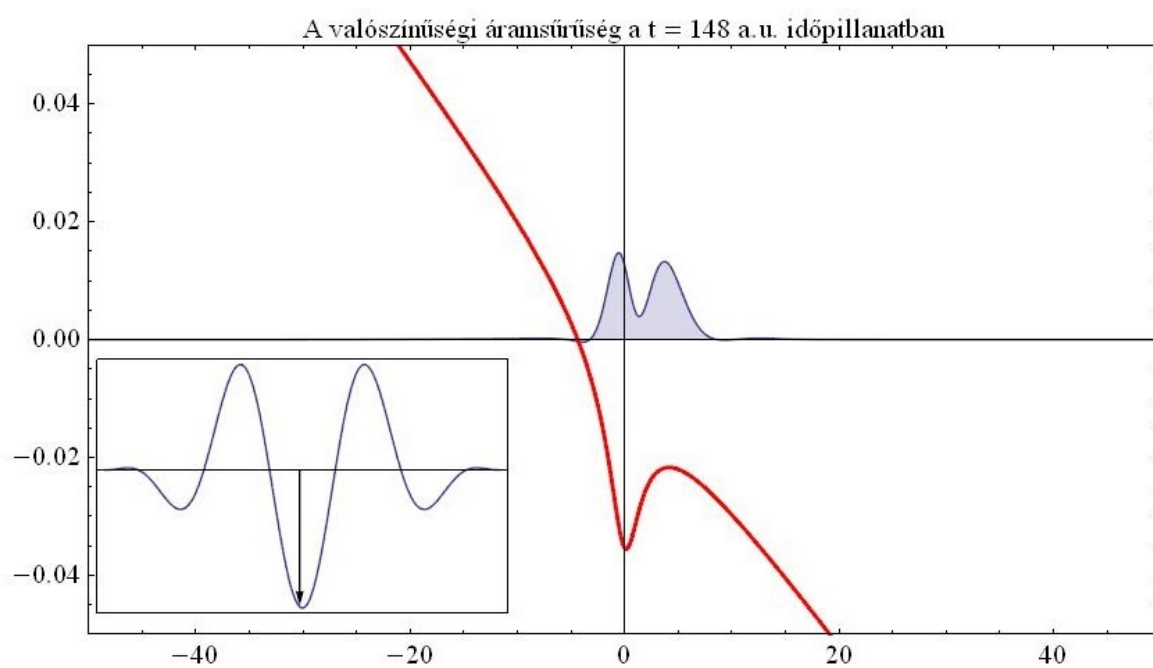
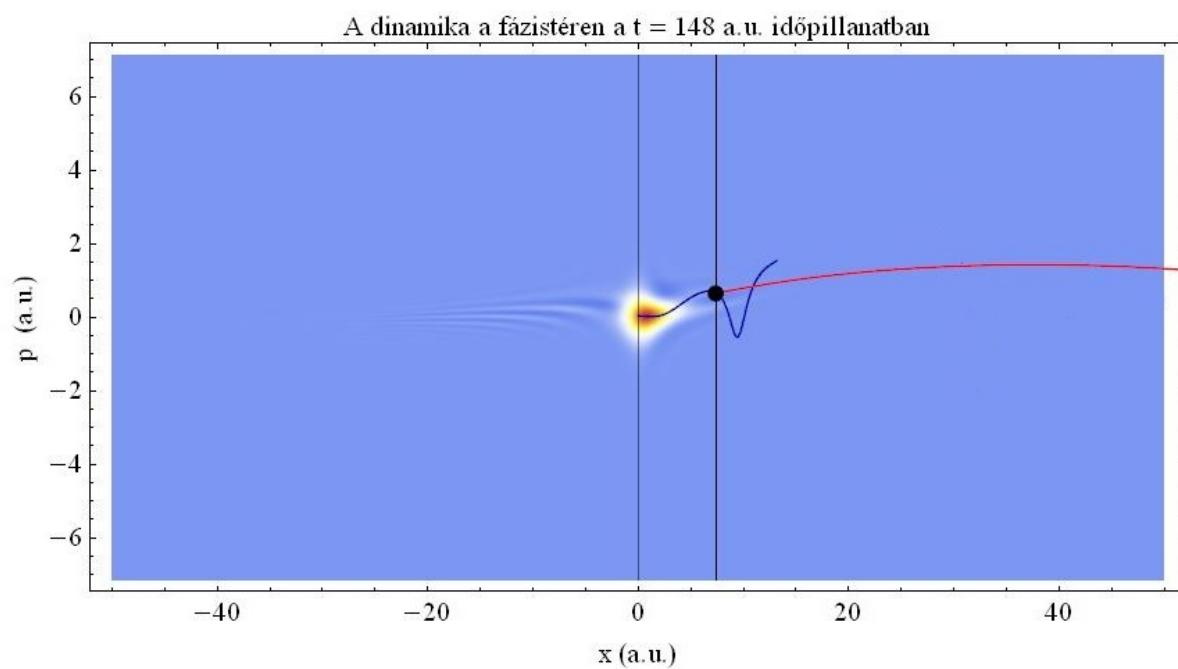
Az előzőekhez hasonlóan, összevetjük az ionizálódott elektron klasszikus dinamikáját a kvantumossal, de most a hidrogén atomot soft-Coulomb potenciállal modellezzük. Jelentős különbség a két modell potenciál között az, hogy míg Dirac-delta potenciál esetén bármilyen térerősség esetén fellép az alagútjelenség, soft-Coulomb potenciál esetén ez nem igaz. Túl nagy térerősség esetén ugyanis a soft-Coulomb potenciál annyira eltorzul, hogy eltűnik a csak alagút-effektussal „leküzdhető” potenciálgát, ekkor már küszöb fölötti ionizációról beszélünk. Ezért mind a kvantumos numerikus szimulációkban mind a klasszikus számolásokban a térerősség numerikus értékét $E = 0.05$ atomi egységnek választjuk. Ennek következtében a potenciálgát sem olyan keskeny mint a Dirac-delta potenciál esetén, így észrevehető alagúteffektus csak a 3-ciklusos lézerpulzus térerősségének főmaximuma körül alakul ki, amikor a potenciálgát a legkeskenyebb. Ezért tehát az alagúteffektus valószínűsége is számottevően kisebb, valamint az elektron kezdőpozíciója is távolabb lesz az atomtörzstől mint az előző esetben. Az elektron kezdőpozícióját ebben az esetben az alábbi egyszerű egyenlet megoldásából kaphatjuk meg minden ionizációs időpillanatra.

$$-I_p = V(x, t) \quad (67)$$

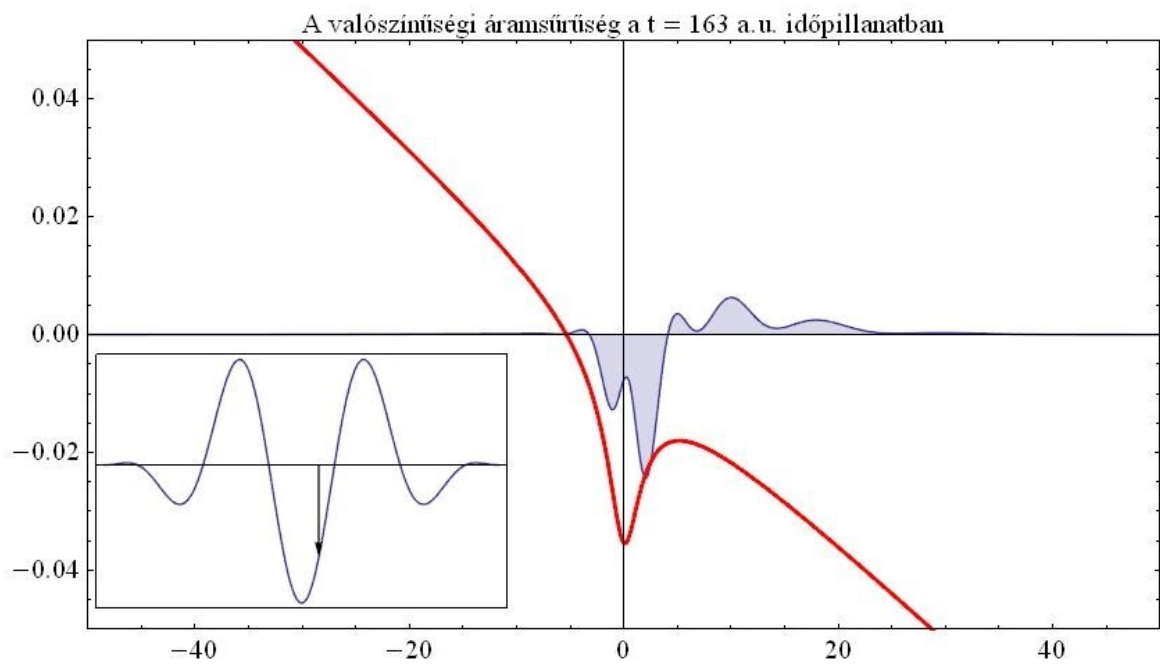
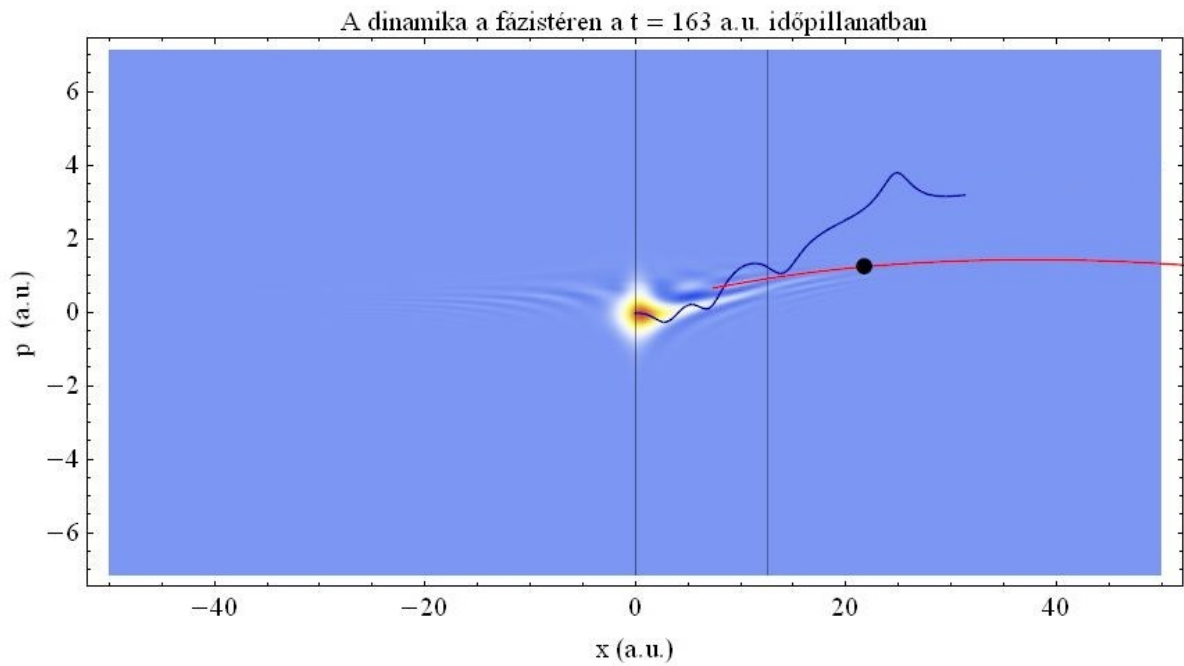
ahol I_p az atom ionizációs potenciálja, hidrogén esetén $I_p = \frac{1}{2}$, $V(x, t)$ pedig a lézertér potenciáljának és a soft-Coulomb modell potenciál összege. A lézertér az előző alszakaszban is használt (11) képlettel leírt 3-ciklusos szinusz-négyzet burkolójú impulzus és az atomi modell potenciál (51) kifejezésében az $a = \sqrt{2}$ értéket választottuk, hiszen a hidrogén atomot szeretnénk modellezni. Itt abban az esetben vetettük össze a klasszikus trajektóriát a kvantum momentum illetve Wigner-függvénnyel, amikor a klasszikus mozgásegyenletekben figyelembe vettük az atomi Coulomb-potenciált (13-15. ábra). Itt a gyengébb tér és a modellpotenciál jellege miatt a lézerpulzus térerősségének első mellékmaximuma környékén nincs számottevő alagútjelenség. Ez egy mérhető különbséget jelenthet a két modell potenciál között, és eldöntheti, melyik áll közelebb a valódi Coulomb-potenciálhoz.

Egy további különbség a két modell potenciál között, hogy a soft-Coulomb potenciált a lézerimpulzus könnyebben eltorzítja, ezért a kötött elektron már a lézerimpulzus elejét is jobban „érzi”.

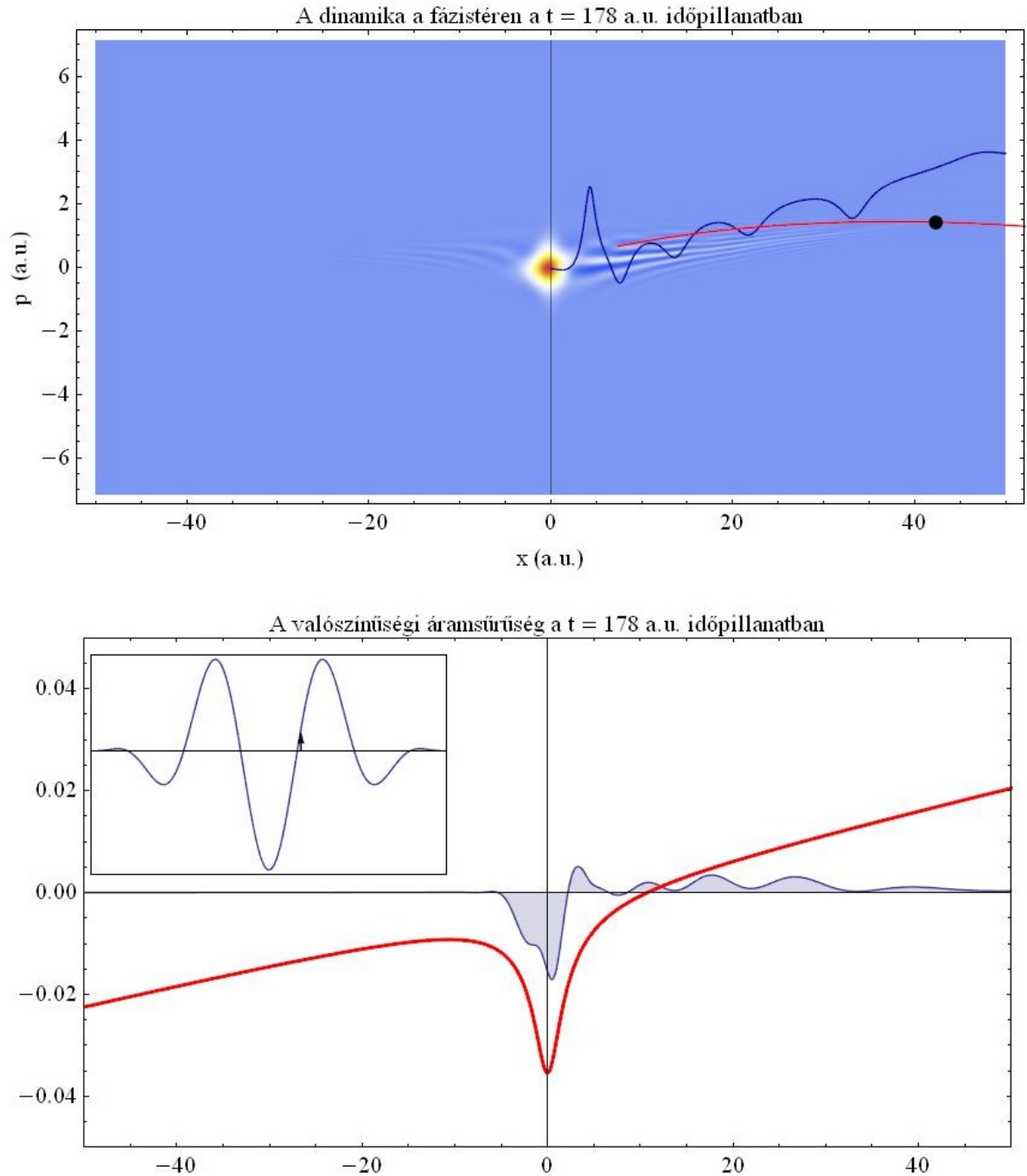
Látható az ábrákon, hogy bár a soft-Coulomb potenciállal modellezett hidrogén atomból optikai alagúteffektussal ionizálódott elektron kvantum momentum függvénye is közel esik az elektron klasszikus trajektóriájához, de az egyezés koránt sem annyira jó, mint a Dirac-delta modell potenciál esetén. Eddigi eredményeink tehát azt mutatják, hogy a Coulomb potenciált is figyelembe vevő klasszikus dinamikai leírás jobban egyezik a Dirac-delta modell potenciál esetében modellezett kvantummechanikai dinamikával, mint a soft-Coulomb potenciál esetében modellezettel. Ha elfogadjuk azt, hogy a klasszikus leírás jól egyezik olyan kísérletekkel, amikor nincs újraszóródás (rescattering) az iontörzsön (pl. klasszikusan számolt ATI spektrumok), akkor ebből arra a kissé meglepő következtetésre juthatunk, hogy a Dirac-delta jobb egydimenziós kvantumos modell potenciál ezekben az esetekben, mint a soft-Coulomb potenciál. Azaz, a Dirac-delta kötött állapotának hasonlósága a H-atom alapállapotához fontosabb tulajdonság, mint a Coulomb-kölcsönhatást nagyobb távolságokon történő figyelembe vétele.



13. ábra. A fázistér és a valószínűségi áramsűrűség a $t = 148$ atomi időpillanatban.



14. ábra. A fázistér és a valószínűségi áramsűrűség a $t = 163$ atomi időpillanatban.



15. ábra. A fázistér és a valószínűségi áramsűrűség a $t = 178$ atomi időpillanatban.

5.4. A szakaszban bemutatott eredményeim összefoglalása

Ebben a szakaszban összevetettem a hidrogén atomból 3-ciklusos lézerimpulzussal optikai alagúteffektussal ionizálódott elektron klasszikus és kvantumos dinamikáját a fázistéren. Ehhez be kellett vezetni a fázistéren értelmezett releváns fizikai mennyiségeket, a Wigner-függvényt és az ún. „quantum momentum” függvényt. Láthattuk, hogy mind Dirac-delta

mind pedig soft-Coulomb modell potenciál esetén a kvantum momentum függvény és a Wigner-függvény fő „hullámvonulatai” nem esnek messze az elektron klasszikus trajektóriájától. Ez alátámasztja a klasszikus elméletek használhatóságát. Azonban azt is észrevehetjük, hogy a Dirac-delta modell potenciál esetén a kvantumos és klasszikus fázistér dinamikában jobb, mint a soft-Coulomb modell potenciál esetén. Ha elfogadjuk azt a tényt, hogy a klasszikus számolás jól egyezik olyan kísérleti eredményekkel, amikor az elektron nem szóródik újra az atomtörzsön, akkor azt a kissé meglepő következtetést vonhatjuk le, hogy a Dirac-delta jobb egydimenziós modellje a háromdimenziós Coulomb-potenciálnak, mint a soft-Coulomb.

6. Az elektron egydimenziós és 3 dimenziós kvantumos dinamikájának összehasonlítása

Az előző szakaszban megvizsgáltuk a két legtöbbet használt egydimenziós modell potenciál viszonyát a klasszikus számításokhoz a fázistéren. Azonban, igazából egyik modell potenciál sem tekinthető igazán jó egydimenziós modelljének a valódi háromdimenziós Coulomb-potenciálnak. Ha az előző szakaszban bemutatott ábrákat egy kicsit jobban megvizsgáljuk látható, hogy a Dirac-delta modell potenciál szingularitása jobban köti az elektront az atomtörzshöz. A soft-Coulomb potenciál esetén azonban, vélhetően a szingularitás hiánya miatt, már kisebb térerősség esetén is egy nagyságrenddel nagyobb a valószínűségi áramsűrűség, mint az alábbiakban bemutatott ábrákon látható.

Ebben a szakaszban a háromdimenziós Coulomb-potenciállal leírt hidrogén atom kvantumos dinamikáját vetjük össze egydimenziós modell potenciál kvantumos dinamikájával ugyancsak a fázistéren. A bejövő lézerimpulzus melyben a dinamikát vizsgáljuk a már ismertetett (11) képlettel leírt 3-ciklusos lézerimpulzus. Természetesen azt is vizsgáljuk, hogy akár az egydimenziós akár a háromdimenziós kvantumos szimulációknak milyen a viszonya a klasszikus számításokhoz, tehát a fázistéren a dinamika mutat-e olyan jó egyezést, mint azt az előző szakaszban láthattuk. A valódi háromdimenziós Coulomb-potenciállal a szimuláció $E = 0,06$ a.u. térerősséggel lett elvégezve. A korábban bevezetett ábrázolási technikával három különböző időpillanatban ábrázoltuk a fázisteret és a valószínűségi áramsűrűséget a három dimenziós kvantumos szimuláció esetén a lézertér polarizációjának irányában úgy, hogy a hengerszimmetrikusan elvégzett szimulációt a sugárirányú koordináta szerint kiintegráltuk. (16-18. felső ábra). Az összehasonlításnál az áramsűrűséget, mint fizikailag releváns mennyiséget vesszük alapul.

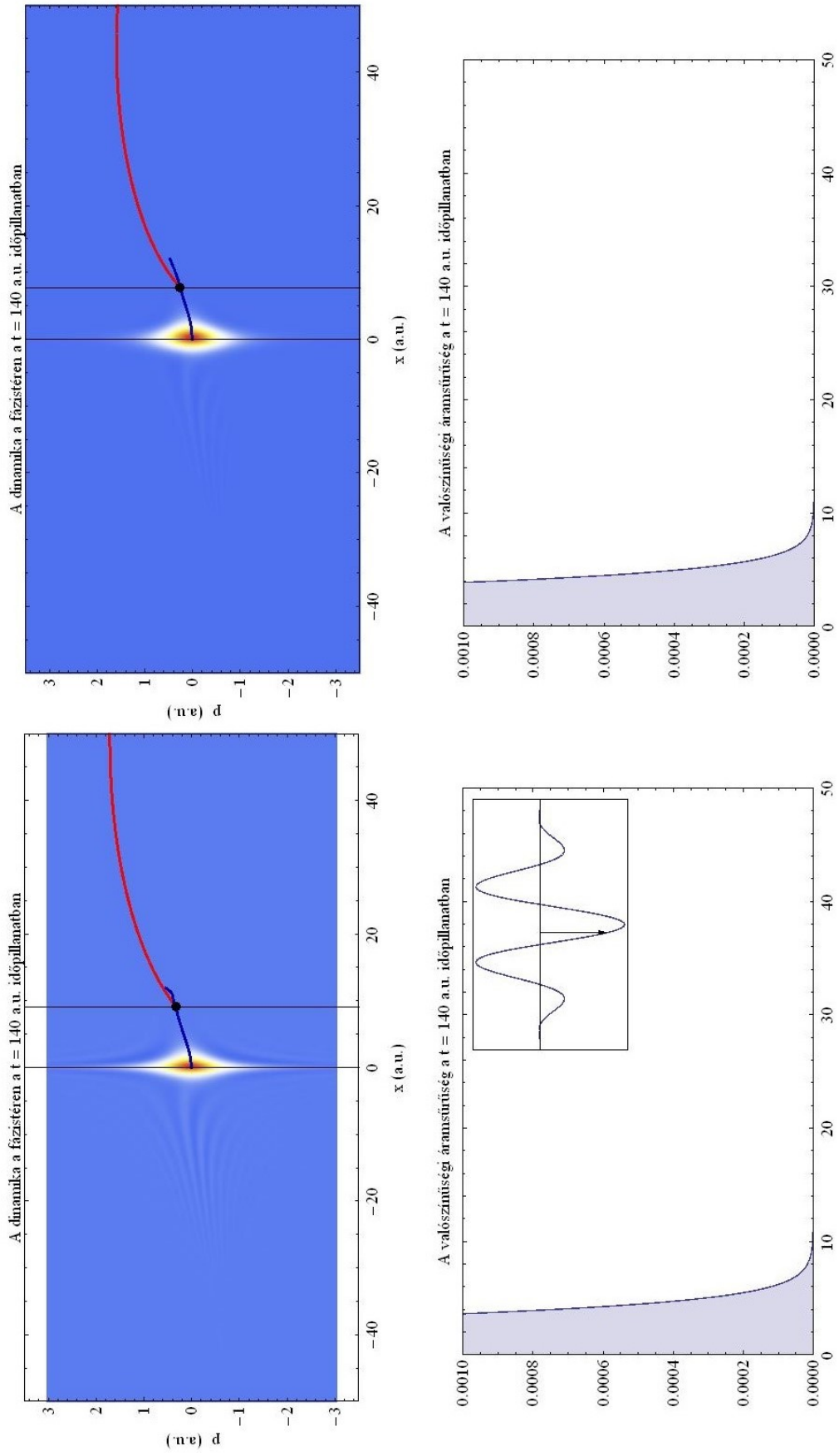
Hasonlítsuk össze az elektron dinamikáját a lézerimpulzus polarizációjának irányában a fázistéren abban az esetben, amikor a hidrogén atomot a valódi háromdimenziós Coulomb-potenciállal vesszük figyelembe, illetve akkor amikor egydimenziós potenciállal modellezzük. Az előző szakaszban láttuk, hogy sem a soft-Coulomb sem a Dirac-delta modell potenciál nem bizonyul igazán jó egydimenziós modelljének a valódi három dimenziós Coulomb potenciálnak. Tehát megalapozott az a felvetés, hogy egy új egydimenziós modell potenciált vezessünk be, amely az előző két modell potenciál, a Dirac-delta és soft-Coulomb, súlyozott összegeként áll elő.

$$V_K(x) = C_1 V_D(x) + C_2 V_C(x) \quad (68)$$

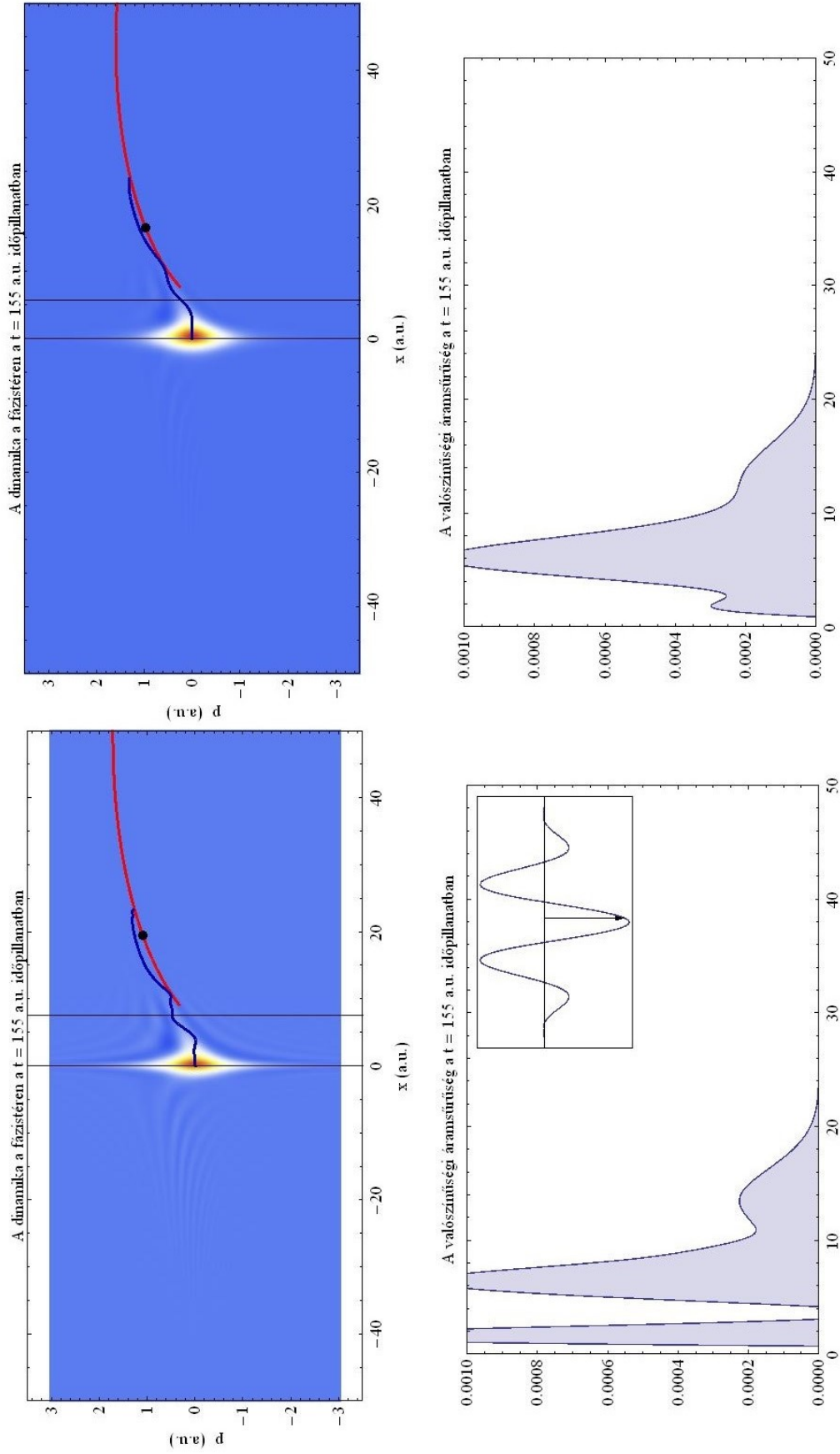
Ebben az esetben is a Dirac-delta modell potenciál paraméterét $u_0 = 1$ -nek és a soft-Coulomb modell potenciál simító paraméterét az előzőekhez hasonlóan $a = \sqrt{2}$ -nek választjuk. A C_1 és C_2 súlyokat próbálgatással tudjuk beállítani úgy, hogy az alapállapot energiája $-\frac{1}{2}$ legyen. Végtelen sok ilyen összetartozó súlyozó paramétert lehet találni, úgy

dönthetjük el mely összetartozó párok alkalmasak a hidrogénatom egydimenziós modellezésére, hogy vizsgáljuk a valószínűségi áramsűrűséget, és természetesen a fázistéren is összevetjük a dinamikát a valódi háromdimenziós Coulomb potenciállal elvégzett szimulációval. Amennyiben $C_1 = 0,55$ és $C_2 = 0,571116$ akkor, ahogyan a 16-18. ábrákon is látható az új kombinált modell potenciállal elvégzett szimuláció (alul) igen jó egyezést mutat a 3 dimenziós kvantum szimulációval (felül). Másrészt az is látható az ábrán, hogy a fázistéren a dinamika is nagy hasonlóságot mutat. Mind a Wigner-függvény, mind a kvantum momentum függvény hasonlít a valódi háromdimenziós dinamikához, és a kvantum momentum függvény közelíti a klasszikus trajektóriát. Ezen klasszikus trajektóriák mindkét esetben a tényleges, adott szimulációban alkalmazott potenciál „alagútkijáratától” indulnak.

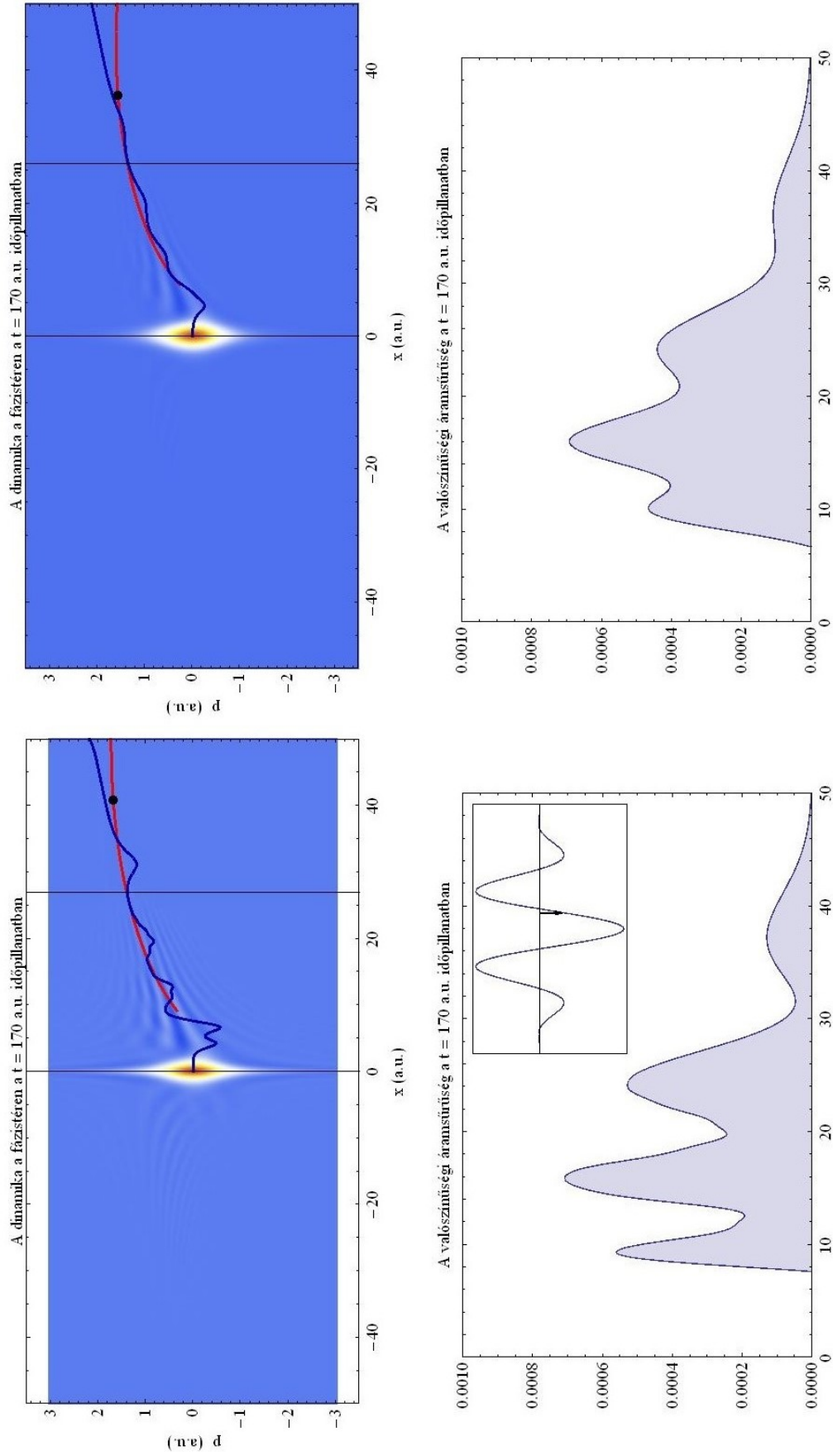
Összefoglalva, tehát felhasználva a kutatócsoport által rendelkezésünkre bocsátott háromdimenziós Coulomb-potenciállal leírt hidrogén atom és 3-ciklusos ultrarövid intenzív lézerimpulzus kvantummechanikai szimulációjának eredményét, megmutattuk, hogy a két egydimenziós modell potenciál súlyozott összegéből lehet egy új modell potenciált alkotni, amely alkalmasabb a hidrogén egydimenziós modellezésére, mint akár a Dirac-delta akár a soft Coulomb-modell potenciál. Ezt az állítást úgy támasztottuk alá, hogy összevetettük a háromdimenziós Coulomb-potenciál és az új modell potenciál esetén az áramsűrűséget, valamint a dinamikát a fázistéren.



16. ábra. A fázistér és a valószínűségi áramsűrűség a $t = 140$ atomi időpillanatban.



17. ábra. A fázistér és a valószínűségi áramsűrűség a $t = 155$ atomi időpillanatban.



18. ábra. A fázistér és a valószínűségi áramsűrűség a $t = 170$ atomi időpillanatban.

7. Az optikai alagúteffektus körülményeinek számítása detektált impulzusból

A 3. szakaszban láthattuk, hogy a klasszikus mozgásegyenletek analitikus megoldásából egy olyan közelítő összefüggés származtatható, amely az ionizálódott elektron detektált impulzusából segít nekünk visszakövetkeztetni az alagúteffektus körülményeire. Ebben a szakaszban megmutatjuk, hogy ez az összefüggés igen jó közelítés akkor, amikor az eredeti klasszikus analitikus számítás is jól használható, tehát amikor az alagúteffektust követően elhanyagolhatjuk az atomi Coulomb-potenciált. Mivel mérési eredmények nem állnak rendelkezésünkre, ezért a következőképpen szimulálunk mérést. Az előző szakaszban is felhasznált háromdimenziós kvantumos szimuláció segítségével megkapjuk az alagút „kijáratában” a kezdőimpulzusokat, majd ezen kezdőimpulzusokkal az elektront, mint klasszikus részecskét elfejlesztjük az időben a (22) és (23) képletek segítségével. Így megkapjuk a detektoron mérhető impulzusokat. Ezután a (31) - (34) összefüggések helyes kombinálásával kapunk egy közelítő értéket az x - és z -irányú kezdőimpulzusokra valamint az ionizációs időre. Ezeket pedig össze tudjuk vetni a tényleges, szimulációból nyert értékekkel.

A lézertér polarizációja és terjedési iránya szerinti kezdőimpulzusokat úgy nyerjük ki a háromdimenziós kvantumos szimulációból, hogy a (61) képlet háromdimenziós általánosításával kapunk egy vektormezőt, amely nem más, mint a hullámfüggvény argumentumának gradiense, azaz a kvantum momentum függvény. Ezen vektormezőt kiértékelve a lehetséges alagútkijáratokban minden időpillanatban kapunk egy adatsereget, amelyek a valamilyen valószínűséggel kialagutazott elektron, mint klasszikus részecske keresett kezdőimpulzus komponensei. Természetesen ismerjük az időpillanatot is, amikor a kiértékelést megtesszük. Ezen kezdőfeltételekkel pedig a (22) és (23)képletek alapján a detektoron vélhetően mért impulzuskomponensek meghatározhatók.

Ahhoz, hogy meghatározzuk a szimulált mérés eredményéből azt, hogy az elektron mint klasszikus részecske mikor és mekkora kezdőimpulzussal jutott át a potenciálgáton, alábbi eljárást célszerű követni. Először meghatározzuk β értékét a (34) összefüggés alapján, azaz

$$\beta = \frac{1}{2c} \left(-p_x^d - \sqrt{(p_x^d)^2 - 4cp_z^d} \right) \quad (69)$$

ahol β a 3. szakaszban bevezetett, (24) képlettel leírt argumentum, p_x^d és p_z^d pedig a detektoron „mért” impulzuskomponensek. Az ionizáció ϕ fázisát megkapjuk, ha megoldjuk az alábbi egyenletet.

$$\beta = \frac{E_0}{16c\omega} \left(6 \sin \left(\frac{2\phi}{3} \right) - 8 \sin(\phi) + 3 \sin \left(\frac{4\phi}{3} \right) \right) \quad (70)$$

Az ionizációs fázis és az ionizációs idő közötti kapcsolatot az esetünkben 3-ciklusos lézer-

Az alagút kijáratának koordinátái	Polarizáció irányú tényleges kezdőimpulzus	Polarizáció irányú számolt kezdőimpulzus	Relatív eltérés a polarizáció irányában	Terjedés irányú tényleges kezdőimpulzus	Terjedés irányú számolt kezdőimpulzus	Relatív eltérés a terjedés irányában	Számolt ionizációs idő	Relatív eltérés az ionizációs időben
{5,7573 ; 0,7148}	0,2881	0,2915	0,0117	0,0174	0,0175	0,0004	145,059	0,0004
{5,8073 ; 1,0354}	0,2932	0,2941	0,0028	0,0250	0,0250	0,0001	145,014	0,0001
{5,8573 ; 1,2988}	0,2987	0,2968	0,0065	0,0314	0,0314	0,0001	144,966	0,0002
{5,9073 ; 1,5362}	0,3039	0,2994	0,0148	0,0370	0,0370	0,0003	144,921	0,0005
{5,9573 ; 1,7593}	0,3088	0,3019	0,0225	0,0422	0,0422	0,0004	144,878	0,0008
{6,0073 ; 1,9743}	0,3138	0,3043	0,0300	0,0471	0,0470	0,0005	144,834	0,0011
{6,0573 ; 2,1848}	0,3186	0,3068	0,0371	0,0516	0,0515	0,0005	144,792	0,0014
{6,1073 ; 2,3932}	0,3236	0,3093	0,0443	0,0559	0,0559	0,0006	144,748	0,0017
{6,1573 ; 2,6012}	0,3284	0,3117	0,0509	0,0600	0,0599	0,0007	144,705	0,0020
{6,2073 ; 2,8102}	0,3325	0,3137	0,0564	0,0637	0,0637	0,0007	144,669	0,0023

1. táblázat. A táblázatban a $t = 145$ időpillanatban optikai alagúteffektussal ionizálódott elektron tényleges és a szimulált mérésből visszszámolt kezdőértékei láthatók. Feltűntettük még ezen két érték relatív eltérését is.

impulzusra az alábbi egyszerű összefüggés teremti meg.

$$t_{ion} = \frac{\phi}{\omega} \quad (71)$$

Ezzel az ionizációs idővel illetve a szimulált mérési eredményekkel, már az egzakt, klasszikus mozgásegyenletekből származtatott képlet használható.

$$p_x^0(p_x^d, p_z^d, \phi) = p_x^d \cos(\beta) + (c - p_z^d) \sin(\beta) \quad (72)$$

$$p_z^0(p_x^d, p_z^d, \phi) = c + (p_z^d - c) \cos(\beta) - p_x^d \sin(\beta) \quad (73)$$

A 1. táblázatban látható a $t = 145$ ionizációs időpillanatban kialagutazott elektron a tényleges kezdeti értékei, valamint a szimulált mérésből visszszámolt értékek. Feltűntettük még a számolt értékek relatív eltérését is a ténylegestől. Látható, hogy a 4. szakaszban bevezetett összefüggés a fent leírt eljárás alkalmazásával az ionizációs idő és a kezdőimpulzusok nagy pontossággal megkaphatók. Ez alapján azt tudjuk mondani, hogy a módszer jól használható, és viszonylag pontos eredményeket szolgáltat a lehetséges folyamatokra.

A szakaszban bemutatott eredményeket összegezve elmondhatjuk, hogy a 4. szakaszban levezetett klasszikus mozgásegyenletek analitikus megoldásából származtatott egzakt és közelített összefüggések megfelelő kombinálásával, egy olyan módszer adható az optikai alagúteffektus által ionizálódott elektron klasszikus értelemben vett kezdőimpulzusa és ionizációs ideje meghatározására, amely relatíve nagy pontossággal alkalmazható, és kísérletileg könnyen mérhető mennyiségekből segít nekünk információt nyerni az alagúteffektus eddig nem ismert körülményeire.

8. Összefoglalás

A dolgozatban áttekintettük milyen folyamatok játszódhatnak le intenzív, ultrarövid lézerimpulzus és atom kölcsönhatásakor, ismertettük a szakirodalomban megjelent főbb elméleteket és módszereket a témakör leírására.

Ezután az attoszekundumos lézerimpulzusok keltésekor leginkább fontos folyamatot, az optikai alagúteffektust tárgyaltuk részletesen. Először egy a hidrogén atomból lineárisan polarizált lézertér hatására optikai alagúteffektussal ionizálódott klasszikus elektron mozgásegyenletét oldottuk meg analitikusan, szabad paraméterként meghagyva a lézerimpulzus fázisát az ionizáció pillanatában és az alagúteffektus utáni kezdőimpulzust. Így az ionizálódott elektron impulzusának időfüggésére egy analitikus képletet származtattunk, amikor 3-ciklusos szinusz négyzet burkolójú lézerimpulzussal hat kölcsön a hidrogén atom. Megmutattuk, hogy az analitikus megoldhatóság akkor is fennáll, ha a lézerimpulzusban változóként benne hagyjuk a vivő-burkoló fáziskülönbséget. Fizikailag és matematikailag megalapozott közelítő összefüggések segítségével egy új módszert adtunk arra, hogy a kiszakított elektron kísérletileg mérhető impulzusból, hogyan lehet visszakövetkeztetni az optikai alagúteffektus fontos körülményeire, mint az ionizációs idő illetve az alagút effektus utáni kezdőimpulzus. Ezt a módszert háromdimenziós kvantum szimuláció segítségével mérést szimulálva sikerrel teszteltük: az alagutazás főbb paraméterei akár százalék alatti hibával is meghatározhatók.

Ezt követően a kvantummechanika eszközeivel modelleztük a problémát. A numerikus szimulációkat kétféle modell potenciállal (Dirac-delta és soft-Coulomb) végeztük el. Ezután a klasszikus fázistéren a Wigner-függvény és a kvantum momentum függvény segítségével összevetettük a klasszikus és a kvantum dinamikát. Ezek alapján azt tudjuk állítani, hogy a gyakran használt klasszikus közelítések (pl. magasrendű harmonikus keltés 3 lépéses modellje) megalapozottak, hiszen a kvantum momentum függvényt jól közelíti a klasszikus trajektória a releváns tartományban (ahol az áramsűrűség jelentős). Továbbá, mivel a trajektóriák nem mutatnak jelentős eltérést a kvantum momentum függvénnyel való egyezésben akkor, amikor Coulomb-potenciállal vagy anélkül oldjuk meg a klasszikus mozgásegyenleteket, alátámasztható az általunk származtatott analitikus kifejezés használhatósága. A Coulomb potenciált is figyelembe vevő klasszikus dinamikai leírás jobban egyezik a Dirac-delta modell potenciál esetében modellezett kvantummechanikai dinamikával, mint a soft-Coulomb potenciál esetében modellezettel, amiből arra következtethetünk, hogy a Dirac-delta kötött állapotának hasonlósága a H-atom alapállapotához fontosabb modell-tulajdonság, mint a Coulomb-kölcsönhatást nagyobb távolságokon történő figyelembe vétele.

Végül az alapján, hogy sem a Dirac-delta sem a soft Coulomb-modell potenciál nem bizonyult igazán jó egydimenziós hidrogén atom modellnek, bevezettünk egy új modell potenciál, amely a két modell potenciál súlyozott összegeként áll elő, alapállapot energiája

megegyezik a hidrogén atom alapállapot energiájával, és hasonló térerősség esetén hasonló nagyságú és lokalizáltságú áramsűrűséget produkál.

I. Függelék: Saját eredmények összefoglalása

A kutatási témám alapötlete Wang és Eberly cikke [1] alapján született. Céлом ehhez hasonlóan, az optikai alagúteffektussal a potenciálgáton már átjutott elektron klasszikus mozgásegyenletének analitikus megoldása volt, de kevesebb elhanyagolással, és elliptikus helyett lineáris polarizációjú lézertér esetén. Ezt először folytonos lézertér (azaz elektromágneses síkhullám), majd ezután néhány-ciklusú ultrarövid lézerimpulzus esetére is megoldottam, a mágneses mezőt és a nem-nulla kezdőimpulzust is figyelembe véve.

Ezt a megoldás felhasználva, közelítő eljárást adtam arra, hogyan lehet az elektronok kísérletileg mérhető impulzuskomponenseiből kiindulva kiszámítani az optikai alagutazásos ionizáció időpontját és alagutazás utáni kezdőimpulzust. Ezt az eljárást egy, a kutatócsoportunk által rendelkezésemre bocsátott 3-dimenziós kvantummechanikai numerikus szimuláció eredményeit felhasználva sikerrel teszteltem is.

A garchingi Max Planck Intézetben töltött szakmai gyakorlatomon tanultakat is felhasználva elvégeztem az egydimenziós Dirac-delta és a soft-Coulomb modell potenciállal modellezett hidrogén atom és 3-ciklusos intenzív lézerimpulzus kölcsönhatásának kvantummechanikai szimulációját Crank-Nicolson módszerrel. Ebből numerikusan kiszámítottam a Wigner-függvényeket és a kvantum momentum függvényeket, majd ezeket összehasonlítottam a fázistéren a klasszikus mozgásegyenletek analitikus megoldásából származó trajektóriákkal. Az eredményeket elemeztem és levontam a fizikai következtetéseket.

A kutatócsoportunk által rendelkezésemre bocsátott 3-dimenziós kvantummechanikai numerikus szimuláció eredményeit a fázistéren összevetettem a két egydimenziós modell potenciállal és elemeztem előnyeiket és hátrányaikat. Ezek alapján megtaláltam egy olyan új kombinált modell potenciál paramétereit, amely a két modell potenciál súlyozott összegként áll elő, alapállapot energiája megegyezik a hidrogén atom alapállapot energiájával, és hasonló térerősség esetén hasonló nagyságú és lokalizáltságú áramsűrűséget produkál.

Lezárás dátuma: 2015. január 7.

Hivatkozások

- [1] Xu Wang and J. H. Eberly. Classical theory of high-field atomic ionization using elliptical polarization. *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 86:013421, 2012.
- [2] F. Krausz and M. Ivanov. Attosecond physics. *Reviews of Modern Physics*, 81, 2009.
- [3] M. Protopapas, C. H. Keitel, and P. L. Knight. Atomic physics with super-high intensity lasers. *Reports on Progress in Physics*, 60:389–486, 1997.
- [4] Leonid Veniaminovich Keldysh. Ionization in the field of a strong electromagnetic wave. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 20:1307, 1965.
- [5] P. B. Corkum. *Phys. Rev. Lett.*, 71:1994, 1993.
- [6] Sándor Varró. *Bevezetés az intenzív fény és anyag kölcsönhatásának elméleti leírásába*. Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Fizikai Tanszék, 2010.
- [7] D. B. Milosevic, G. G. Paulus, D. Bauer, and W. Becker. Above-threshold ionization by few-cycle pulses. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 39:R203–R262, 2006.
- [8] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, 1997.
- [9] Kenneth J. Shafer. *Strong Field Laser Physics, Chapter: Numerical Methods in Strong Field Physics*. Springer, 2009.
- [10] E. P. Wigner. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium. *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics*, 40:749, 1932.
- [11] Mohsen Razavy. *Quantum Theory of Tunneling*. World Scientific, 2003.
- [12] Gy. Farkas and Cs. Tóth. *Phys. Lett. A*, 168:447, 1992.
- [13] K. C. Kulander and K. J. Schafer. Proc. int. conf. multi photon processes vi. 1993.
- [14] M. Lewenstein, Ph. Balcou, M.Yu. Ivanov, A. L’Huillier, and P.B. Corkum. Theory of high-order harmonic generation by low-frequency laser fields. *Phys. Rev. A*, 49 2117, 1994.
- [15] M. Schultze and et al. Delay in photoemission. *Science*, 328:1658, 2010.

Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretném megköszönni Dr. Czirják Attila címzetes egyetemi docensnek, hogy szakmai tudásával és útmutatásával segítette a munkámat.

Külön köszönetet mondok Majorosi Szilárd PhD hallgatónak a numerikus szimulációkban nyújtott segítségért és Szabó Lóránt Zsolt PhD hallgatónak a munkám során nyújtott szakmai segítségért és a dolgozat alapos átnézéséért. Köszönöm Dr. Benedict Mihály tanszékvezető-helyettes egyetemi tanárnak a dolgozattal kapcsolatos hasznos észrevételeit és tanácsait, továbbá Dr. Fehér László tanszékvezető egyetemi tanárnak és a tanszék összes dolgozójának a lehetőséget, hogy a dolgozatomat a Szegedi Tudományegyetem Elméleti Fizikai Tanszéken készíthettem el.

Ezúton szeretném megköszönni Dr. Marcelo Ciappinának, hogy a garchingi MPQ-ban töltött szakmai gyakorlatom során útmutatásával és tanácsaival segítette az erős lézertérben lejátszódó folyamatokról alkotott képem kibővítését és elmélyítését.

Kutatómunkámat az OTKA T81364 számú pályázata, a TAMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0060 azonosító számú „Impulzuslézerek alkalmazása az anyagtudományban és a bio-fotonikában” című és a TAMOP-4.2.2.C-11/1/KONV-2012-0010 azonosító számú „Szuperszámítógép, a nemzeti virtuális laboratórium” című projektek támogatták.