

Magasharmonikus keltés klasszikus és fél- kvantummechanikai modellje

Tudományos Diákköri dolgozat

Kőrös Pál Csaba

Fizika BSc

témavezető:

Dr. Geretovszkyné Dr. Varjú Katalin

Tudományos főmunkatárs

Szegedi Tudományegyetem Optikai és Kvantumelektronikai Tanszék



Szeged, 2014.

Tartalomjegyzék

I.	Bevezetés	2
II.	Nemlineáris optika, magasrendű harmonikusok keltése	3
III.	Monokromatikus tér klasszikus és fél-kvantummechanikai leírása	5
I.	A háromlépcsős modell	5
II.	Klasszikus számítások	7
III.	Az erőstér közelítés és a nyeregponthoz tartozó egyenletek	11
IV.	Fél-kvantummechanikai számítások	13
IV.	Összetett lézerterek összehasonlítása	18
I.	Monokromatikus tér DC tér jelenlétében	18
a)	Klasszikus leírás	18
b)	Fél-kvantummechanikai leírás	22
II.	$\omega/2\omega$ tér	24
a)	Klasszikus leírás	24
b)	Fél-kvantummechanikai leírás	26
III.	Ultrarövid lézerimpulzus	28
a)	Klasszikus leírás	28
b)	Fél-kvantummechanikai leírás	30
V.	Összegzés	32
VI.	Köszönetnyilvánítás	33
VII.	1. Függelék	34
VIII.	Források	35

I. Fejezet

Bevezetés

Dolgozatomban a magasharmonikus keltés modelljeit fogom bemutatni és összehasonlítani, illetve számításokat végzek bizonyos lézerterekre. Ez az atomfizikai folyamat játszik közre az attoszekundumos ($1\text{as} = 10^{-18}\text{ s}$) lézerimpulzusok keltésében, ami az ultragyors optika igen fontos területe.

Azon emberi törekvésen túl, hogy a korábbi eredményeket túlszárnyalva, jobbat, tökéletesebbet építsünk valamiből, - ami jelen esetben intenzívebb és gyorsabb lézerimpulzust jelent, - e célt a szükség tűzte ki a kutatók elé. A szükség pedig nem más, mint a természet mikroszkopikus, ultragyors folyamatainak jobb megértése, mintegy „lefényképezése”. Ezen az időskálán mozognak ugyanis a molekulákban, atomokban az elektronok, amely mozgás tulajdonságainak ismerete szükséges számos folyamat magyarázatához. Ha szeretnénk jobban megismerni, hogy mi játszódik le a kémiai, biokémiai folyamatokban, vagy ha betekintést szeretnénk nyerni a félvezetőkben lejátszódó elektronmozgásba, netán manipulálni szeretnénk mindezen folyamatokat, akkor fontos minél rövidebb impulzushosszú, minél intenzívebb fényforrásokat létrehozni. [1]

Mivel a fény elektromágneses hullám, adott hullámhossz esetén egy optikai ciklusnál nem lehet rövidebb a fényjel. Ez a sajátosság látható fény esetén a néhány femtoszekundumos ($1\text{fs} = 10^{-15}\text{ s}$) időtartamra korlátozza az impulzushosszt. Ez elegendő az atomi mozgás vizsgálatához, de az elektronok mozgásához hosszú. Ahhoz, hogy attoszekundumos legyen az impulzushossz, a látható fény helyett távoli ultraibolya- (XUV), illetve röntgensugárzást kell alkalmaznunk. Mindehhez olyan sáv szélességű erősítésre lenne szükség, amilyen lézer-anyag nem létezik tudomásunk szerint. A feladat tehát a lézer kedvező tulajdonságainak átörökítése egy nagy sáv szélességű, magasabb központi frekvenciájú tartományba. Ez az a feladat, amit el tudunk végezni egy nemlineáris kölcsönhatás, a magasharmonikus keltés segítségével.

Dolgozatomban ennek a folyamatnak a klasszikus, valamint a fél-kvantummechanikai modelljét vizsgáltam. Először monokromatikus tér esetén összehasonlítottam a két modell segítségével kapott eredményeket: a keletkező sugárzás főbb tulajdonságait. Elkészítettem a fél-kvantummechanikai modellből származtatható spektrumot, illetve megkísértem a klasszikus

modell segítségével intuitív érveléssel spektrális amplitúdót rendelni a sugárzáshoz. Ezek után összehasonlításokat végeztem más, összetett lézerterekre.

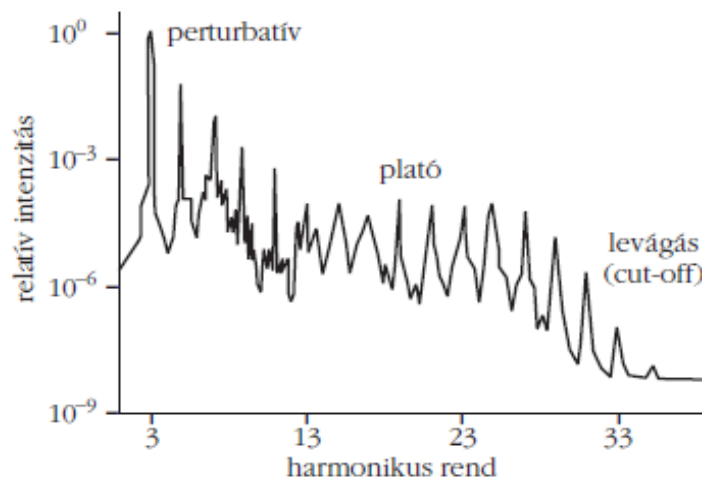
II. Fejezet

Nemlineáris optika, magasrendű harmonikusok keltése

Szabad atom külső elektronjai az atommag és a többi elektron által létrehozott Coulomb-féle potenciáltérben mozognak, amelynek térerőssége nagyságrendileg 10^{11} V/m. Az atomtörzsből valamint legkülső elektronból álló rendszert az egyszerűség kedvéért úgy kezeljük, mintha egy proton vonzása hatna az elektronra. Körülbelül 10^{19} W/m² intenzitású lézerimpulzus elektromos tere már összemérhető az iontörzs Coulomb-terével, így a lézertérben lévő atom külső elektronja torzult potenciált érzékel (III.1 ábra). Ekkora intenzitás áll elő, ha 5mJ energiájú, 40fs-os, 8 mm átmérőjű Gaussos lézerimpulzust 1m fókusztávolságú gömbtükörrel fókuszálunk le. Ez azt jelenti, hogy ilyen viszonyok között a kis intenzitáson megszokottól eltérő ionizációs jelenségek is létrejönnek, mint például a többfotonos ionizáció, melynek során több foton együttes elnyelése által tud az elektron leszakadni az atomról. Szintén nemlineáris jelenség az alagútionizáció, amely esetén a lézertér eltorzítja az atomtörzs potenciálterét, és az így létrejövő potenciálgáton már alagúteffektus által ki tud szabadulni az elektron. [2]

Dolgozatomban a magasharmonikus keltéssel fogok foglalkozni, ami egy olyan többfotonos folyamat, melyben kulcsfontosságú szerepet játszik az alagútionizáció. Ha vákuumkamrában elhelyezett gáz targetre nagyintenzitású lézerimpulzust fókuszálunk, azt tapasztaljuk, hogy a lézer terjedési irányában megjelennek a spektrumban a lézer frekvenciájának páratlan többszörösei. Ahhoz, hogy megértsük ezt a speciális folyamatot, vizsgáljuk meg közelebbről, hogy mi történik az atomokkal az ilyen extrém térerősségekben! A lézer elektromos tere kölcsönhatásba lép az atommal, és az atommagot a térrel azonos, az elektronfelhőt pedig az ellentétes irányba húzza. Ezáltal az atomnak egy kicsi, a térrel ellentétes irányú dipólmomentuma keletkezik, ami makroszkopikusan a gáz polarizációjaként jelenik meg. Amíg kicsi a térerősség, addig a dipólmomentum, - ezáltal a polarizáció - képes követni a térerősség szinuszos váltakozását, ám az intenzitás növelésével egyre inkább anharmonikussá válik az elektron mozgása. Ennek eredményeképpen új frekvenciakomponensek jelennek meg a kisugárzott spektrumban, amik szimmetriaokokból az eredeti körfrekvencia páratlan számú többszörösei (II.1 ábra) [3].

A magasharmonikus keltés során annyira eltorzul a külső elektronra ható Coulomb-potenciál, hogy alagúteffektussal az elektron hullámcsomagja, - klasszikusan az elektron – a lézertérbe kerül, és gyorsulva távolodni kezd az atomtörzstől. Amikor a térerősség előjelet vált, az elektronra ható erő iránya is ellentétes lesz, és bizonyos körülmények között visszatérhet az ionhoz, ahol befogódhat. Ebben az esetben az atom a többletenergiát, amit az elektron a lézertérben nyert, egy nagyenergiájú foton kibocsátására fordíthatja. A kibocsátott sugárzás spektrumát mutatja a II.1 ábra, ahol a vízszintes tengelyt frekvencia helyett $m=\omega/\omega_0$ szerint skáláztuk (ω_0 a lézertér körfrekvenciája). A spektrum alacsony frekvenciájú tartományában a csúcsok exponenciális csökkenést mutatnak a perturbációs közelítésnek megfelelően, majd egy széles tartományban, a platóban, közel azonos intenzitásúak maradnak, végül egy hirtelen levágásban, a cut-offban eltűnnek. [3]



II.1. ábra: Magasharmonikus sugárzás spektruma [3]

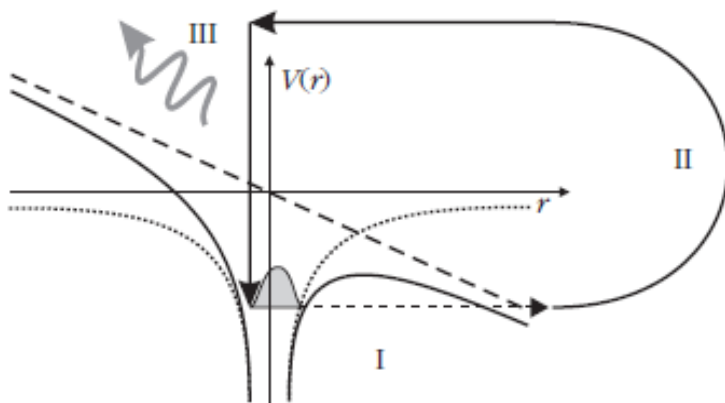
Ez a tulajdonság az, amit fel tudunk használni attoszekundumos impulzussorozat keltésére, hiszen egy állandó amplitúdójú, nagy sávszélességű tartomány áll elő. Mivel a nagy frekvenciájú komponensek emissziója szinuszos elektromos tér esetén minden félperiódusban megtörténik, a spektrumban 2ω távolságokban helyezkednek el a csúcsok. Az így keletkező teljes sugárzásban az impulzusok még nem attoszekundumos hosszúságúak, azonban egy alumíniumszűrő segítségével az alacsonyabb rendeket kiszűrhetjük, ezáltal csak a plató harmonikusait felhasználva, valóban egy attoszekundumos impulzussorozatot kapunk. [3]

III. Fejezet

Monokromatikus tér klasszikus és fél-kvantummechanikai leírása

I. A klasszikus háromlépcsős modell

Jóllehet ez a folyamat erőteljesen kvantummechanikai jellegű, de a nagy fotonsűrűség miatt a lézerteret mindig klasszikusan vizsgáljuk. Számos kísérleti eredményt meg tudunk magyarázni egy intuitív klasszikus modellel. Ezt a modellt szokás háromlépcsős modellnek nevezni, melynek során eltekintünk attól, hogy az ionizáció hogyan történik, csupán a lézertér által gyorsított elektron tulajdonságait vizsgáljuk [4]. A „három lépcső” az elektron ionizációja (I.), a gyorsulás a lézer terében (II.), illetve végül a befogódás (III.). Ezt szemlélteti a következő ábra:



III.1. ábra: A háromlépcsős modell [3]

Az elektronra a lézer elektromágneses terében klasszikusan a Lorentz erő hat:

$$\vec{F} = -e(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}), \quad (1.)$$

ahol e az elemi töltés, $\vec{E}(\vec{r}, t)$ és $\vec{B}(\vec{r}, t)$ az elektromos térerősség, illetve a mágneses indukció, $\vec{v} = d\vec{r}/dt$ pedig az elektron sebessége. Nemrelativisztikus intenzitások esetében elhanyagolhatjuk a mágneses tér hatását. További egyszerűsítésként tegyük fel, hogy az ion vonzó hatása igen kicsi. Ha $\vec{x}$ irányú az elektromos térerősség, akkor egy dimenziós lesz a mozgás, és az m_e tömegű elektron kitérésére írhatjuk:

$$m_e \ddot{x}(t) = -eE(t), \quad (2.)$$

$$x(t) = \frac{-e}{m_e} \int_{t_i}^t \left[\int_{t_i}^{t'} E(t'') dt'' \right] dt' \quad (3.)$$

Az ionizáció időpontja legyen t_i , és tegyük fel, hogy ebben az időpontban jelenik meg zérus kezdősebességgel $x=0$ -ban a kontinuumban az elektron. Adott elektromos térerősség esetén, ily módon ki tudjuk számítani akár analitikusan, akár numerikusan az elektronpályákat.

Bizonyos ionizációs idők esetén elektron visszatérhet az iontörzshöz. A t_r rekombinációs idő az $x(t)$ függvény t_i utáni első zérushelye, mivel a jóval nagyobb tömegű atomtörzs gyakorlatilag az $x=0$ -ból alig mozdul el.

A klasszikus elektronpályák ismeretéből fontos következtetéseket tudunk levonni a kibocsátott sugárzás természetére vonatkozóan. A sugárzás ω körfrekvenciája a visszatérő elektron mozgási energiájával, illetve az I_P ionizációs potenciállal van összefüggésben:

$$\omega = \frac{E_{kin} + I_P}{\hbar}, \text{ ahol} \quad (4.)$$

$$E_{kin} = \frac{m_e v(t_r)^2}{2}, \quad v(t) = \frac{-e}{m_e} \int_{t_i}^t E(t') dt'. \quad (5.) - (6.)$$

A számításokat az argon $I_P = 15.76$ eV ionizációs potenciáljával végeztem.

Ez azt jelenti, hogy ha különböző t_i ionizációs időkhöz meghatározzuk a t_r visszatérési időket, akkor az elektron sebességéből ki tudjuk számítani, hogy milyen frekvenciájú lesz a kibocsátott sugárzás. A klasszikus leíráshoz feltesszük, hogy a kezdőpontba visszatérő elektronok biztosan rekombinálódnak az ionnal. A valóság ennél bonyolultabb, mivel az elektron szóródhat az atomon, vagy másik elektront is kilökhethet [3].

Ezzel az egyszerű modellel tehát ki tudjuk számítani az emittált sugárzás jellemzőit, amik közül a két leglényegesebb eredmény a csörp nagysága, valamint a cut-off helye. A csörpről úgy kapunk információt, ha a kibocsátott sugárzás frekvenciáját a kibocsátás időpontjának függvényében ábrázoljuk. Ez utóbbi gyakorlatilag megegyezik az elektron visszatérési idejével. A legnagyobb harmonikus rend pedig a kinetikus energia maximumának, illetve az atom ionizációs potenciáljának összegéből számolható.

Mindezeken túl, intuitív érveléssel a sugárzáshoz amplitúdót is rendeltem, ezáltal a spektrumot klasszikusan is megkísértem jellemezni. Az eredmény egy olyan kvázi-spektrum lett, amely a plató létezését megjósolja, és függvénymenetben hasonló a kvantummechanikai eszközökkel elkészíthető spektrumokhoz. Ezeket a spektrumokat, illetve az elektronra vonatkozó fázis-energia grafikonokat készítettem el négy lézertérre, és hasonlítottam össze a klasszikus eredményeket a fél-quantummechanikai leírással kapottakkal.

II. Klasszikus számítások

Elsőként az $E(t) = E_0 \sin(\omega_0 t)$ lézertérrel végzett számításaimat, illetve a levont következtetéseimet fogom bemutatni. Ezen számításaimat MathCad Prime 3.0 komputer algebra rendszerben végeztem el. A térerősség egyszerű alakja miatt az integrálásokat ez esetben analitikus módon is elvégeztem, amik a fenti összefüggések szerint a következők lesznek:

$$x(t) = \frac{eE_0}{m_e \omega_0^2} [\sin(\omega_0 t) - \sin(\omega_0 t_i) - \omega_0(t - t_i) \cos(\omega_0 t_i)], \quad (7.)$$

$$v(t) = \frac{eE_0}{m_e \omega_0} [\cos(\omega_0 t) - \cos(\omega_0 t_i)], \quad (8.)$$

$$E_{kin} = \frac{e^2 E_0^2}{2m_e \omega_0^2} [\cos(\omega_0 t_r) - \cos(\omega_0 t_i)] = 2U_p [\cos(\omega_0 t_r) - \cos(\omega_0 t_i)], \quad (9.)$$

ahol U_p a ponderomotoros energia, az E_0 térerősségű, ω_0 körfrekvenciájú szinuszos elektromos térbe helyezett szabad elektron átlagos mozgási energiája.

A lézer I intenzitása és a térerősség amplitúdója közt fennáll:

$$E_0 = \sqrt{\frac{2I}{\epsilon_0 c}}, \quad U_p = \frac{e^2 E_0^2}{4m_e \omega_0^2} \quad (10.)$$

ahol ϵ_0 a dielektromos állandó, c pedig a vákuumbeli fénysebesség. A dolgozatban $I=4 \cdot 10^{14} \text{ W/cm}^2$ intenzitású, azaz $E_0=5.49 \cdot 10^{10} \text{ V/m}$ térerősségű lézerrel számoltam. Ilyen intenzitást kapunk, ha 25GW teljesítményű, 8 mm-es Gauss nyalábot 1 méter fókusz távolságú tükörrel fókuszálunk. A fenti körülmények között $U_p=23.88 \text{ eV}$.

A kitérést ábrázolva az idő függvényében a $t > t_i$ időpontokra meghatározhatjuk a függvény zérushelyét. Mivel a jelenség periodikus, elegendő az $\omega_0 t_i \in [0; \pi)$ ionizációs időpontokhoz meghatározni a visszatérés időpontját. Ezt numerikusan megtehetjük úgy, hogy egy „for” ciklus segítségével, ha az $x(t)$ összefüggésben változtatjuk az ionizációs időpontokat a megadott időtartamon belül, és az így kapott függvény sorozat minden egyes tagjának megkeressük az első t_i utáni zérushelyét. A zérushelykeresést egy beépített algoritmussal végezhetjük, ha megadjuk, hogy milyen határok között keressük a zérushelyeket. Több $x(t)$ függvényt megvizsgálva találhatunk optimális felső határt, míg alsó határnak alkalmas választás az ionizáció időpontjának 1,001-szerese. Az így kapott t_r , t_i , E_{kin} adatok felhasználásával készítettem el a III.2. és 3. ábrákat. Ezeken a mozgási energiát ponderomotoros energia egységekben adtam meg, illetve

$$\varphi_r = \frac{t_r}{T}, \quad \varphi_{flight} = \frac{t_r - t_i}{T}, \quad (11.)$$

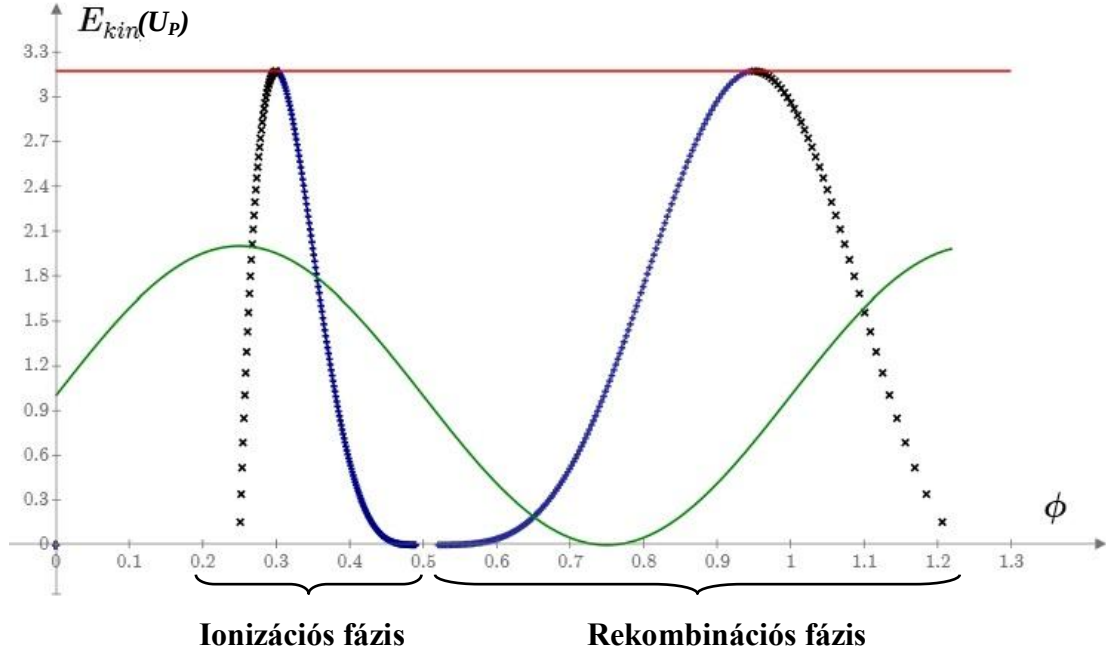
azaz φ_r és φ_{flight} a visszatérési, valamint az elektron kontinuumbeli „repülési” idejéhez tartozó fázis, $T = 2\pi/\omega_0$ pedig a lézer periódusideje.

Az első grafikonról leolvasható, hogy a mozgási energia maximuma $3,173 U_p$, és ez a $0,95T$ visszatérési időhöz tartozik. Ez azt jelenti, hogy ha ismerjük a gáz I_p ionizációs

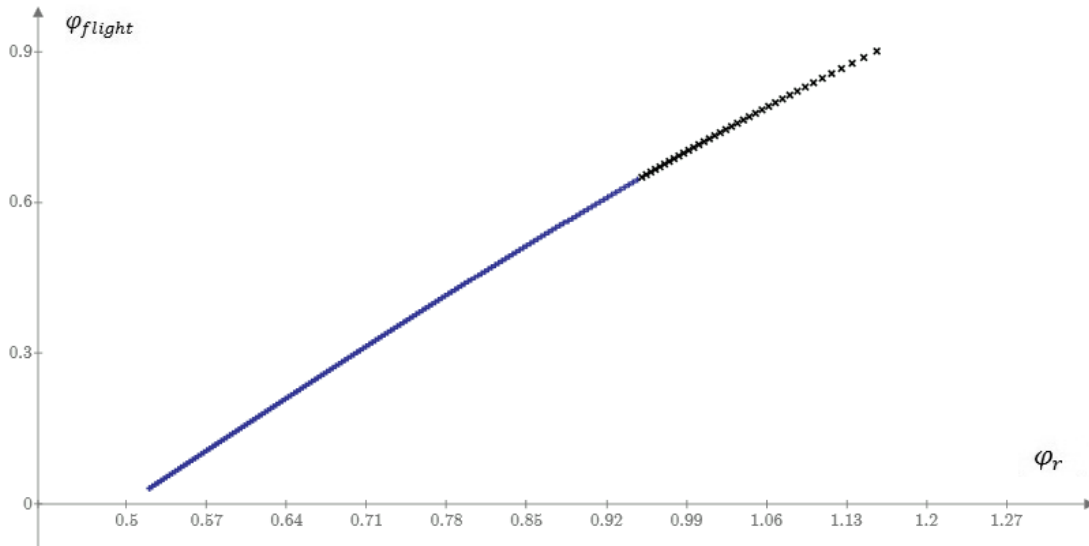
potenciálját, akkor meghatározhatjuk a maximális fotonenergiát is. Tehát a legnagyobb harmonikus m rendjére igaz:

$$m\hbar\omega \leq I_p + 3,173U_p, \quad (12.)$$

ahol m páratlan egész, esetünkben 59.



III.2. ábra: Az elektron mozgási energiája az ionizáció, illetve a rekombináció fázisának függvényében.
A rövid trajektóriákat a kék, a hosszúakat a fekete szimbólumok jelölik.
A zöld görbe a lézer térerősségét szemlélteti.



III.3. ábra: Az elektron repülési fázisa a rekombináció fázisának függvényében

Fontos megjegyezni, hogy csak a lézertér maximumai utáni első negyedperiódusban leszakadt elektronok fognak visszatérni az ionhoz. Az ábrák emiatt a 0,25T és 0,50T közti

ionizációs időnek megfelelő pályákat szemléltetik. Az energia jól láthatóan nő amíg az elektron rekombinációjának ideje $0,95T$ alatt marad, ez után pedig csökken. Amely elektronpályákra a $0,50T < t_r < 0,95T$, azaz $0 < t_r - t_i < 0,65T$ teljesül, azokat rövid trajektóriáknak, amelyikre pedig nem, azokat hosszú trajektóriáknak nevezzük [4]. A rövid trajektóriáknál a fény frekvenciája, ami lineárisan változik a visszatérő elektron mozgási energiájával, nő az idővel együtt, azaz a lézerimpulzus pozitívan, vagy felfelé csörpölt. A hosszú trajektóriáknál ezzel szemben a frekvencia csökken, azaz itt negatív a csörp. A csörp helyett mi a GDD-vel – a spektrális fázis második deriváltjával fogjuk jellemezni a sugárzás fázismodulációját.

A GD, azaz a csoportkésleltetés a spektrális fázis körfrekvencia szerinti első deriváltja. Fizikailag azt jelenti, hogy az ω_m középponti frekvenciájú impulzus mennyit késik egy referencia időponthoz képest. A magas harmonikus keltés esetében ez a mennyiség a rekombinációs idővel azonosítható, mivel ez adja meg a keltett XUV sugárzás kisugárzásának időpontját. A GDD, vagyis a spektrális fázis második deriváltja, az impulzus megnyúlásával hozható kapcsolatba, hiszen azt jellemzi, hogy az attoszekundumos impulzust alkotó spektrális komponensek mennyit késnek egymáshoz képest [5].

$$GD = \varphi'(\omega_m) = \left. \frac{d\varphi}{d\omega} \right|_{\omega=\omega_m}, \quad GD = t_r, \quad (13.) - (14.)$$

$$GDD = \varphi''(\omega_m) = \left. \frac{d^2\varphi}{d\omega^2} \right|_{\omega=\omega_m}, \quad GDD = \partial t_r / \partial \omega. \quad (15.) - (16.)$$

A modellben az $E_{kin}(t_r) \propto \omega(t_r)$ függvény meredekségéből adódik a sugárzás GDD-je. Az így meghatározható $GDD=1.753 \cdot 10^{-32} \text{ s}^2$ -nek adódik a rövid, és a $GDD= -1.379 \cdot 10^{-32} \text{ s}^2$ a hosszú trajektóriák esetén. Ahhoz, hogy Fourier-limitált impulzusokat állítsunk elő, alkalmas szűrőkkel kell manipulálni a spektrumot.

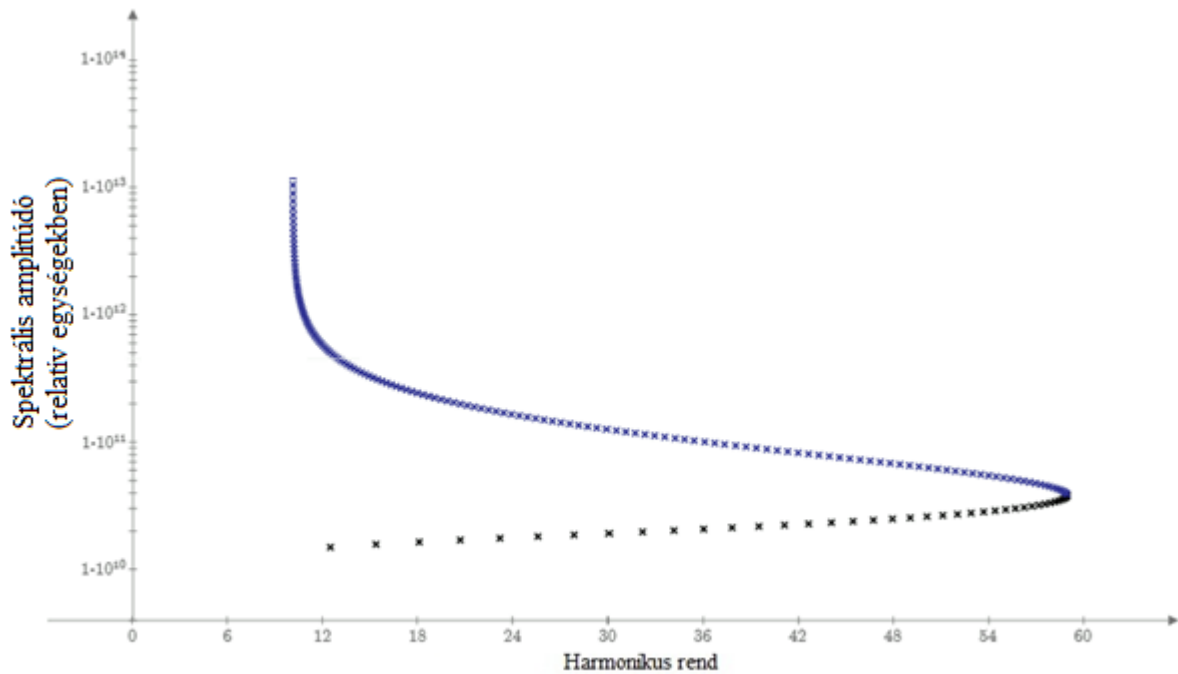
Ahogy az I. alfejezetben is említettük, a klasszikus modell segítségével sikerült a spektrumot rendelni az egyes lézerterekhez. Minden elektronpályához XUV fotonkibocsátást társíthatunk, amelyek energiája

$$\hbar\omega = E_{kin} + I_p. \quad (17.)$$

Habár az alagútionizáció a klasszikus fizika által tiltott lépés, épp ezért eddig nem foglalkoztunk a lezajlásának mikéntjével, illetve annak valószínűségével, most mégis próbáljunk intuitív megfontolásokkal valószínűségi amplitúdót hozzárendelni! Feltételezhetjük, hogy az atom annál nagyobb valószínűséggel ionizálódik, minél nagyobb a térerősség az adott pillanatban, mivel annál inkább torzul az atomtörzs potenciálja. Tegyük fel ezen kívül, hogy annál nagyobb valószínűséggel rekombinálódik az elektron, minél kevesebb időt töltött el a lézertérben. Ezt indokolja az az elképzelés, hogy elektront kvantummechanikailag egy hullámcsomaggal jellemezhetjük, ami jellemzően időben szétterjed, így feltehetőleg egyre nehezebben fogódik be. Tehát az amplitúdó legyen arányos a következőkkel:

$$a(t_i) \propto E(t_i) * \left[\frac{1}{t_{flight}(t_i)} \right]^2, \quad (18.)$$

ahol a második tényezőt azért választottuk négyzetesnek, mert a térben két dimenzióban történik a hullámcsomag szétterülése. A III.4. ábrán látható a monokromatikus térhez ilyen módon rendelhető kvázi-spektrum: a kibocsátott sugárzás frekvenciáját az m harmonikus rend szerint írtam fel, és ennek függvényében ábrázoltam a fent definiált amplitúdót relatív egységekben. Bár ezen spektrális amplitúdó nem mutatja a periodicitást, de mint látni fogjuk, a periodicitás a különböző trajektóriákból származó sugárzás interferenciájának eredménye. Itt nem tudunk fázist számolni, így interferencia sincs, de a legfontosabb eredmény, hogy a magas harmonikusok tartományában olyan sugárzást tapasztalunk, ami egy széles sávban közel konstans amplitúdóval bír, azaz kialakul egy plató-szerű tartomány. A nagyon alacsony harmonikusokra nem tartjuk érvényesnek az eredményeket.



III.4. ábra: Monokromatikus tér keltette sugárzás spektrális amplitúdója

III. Az erőstér közelítés és a nyeregponthoz tartozó egyenletek

A Schrödinger-egyenlettel tudjuk leírni egzakt módon x irányban polarizált lézertér hatását egy atomi potenciál hatása alatt álló elektronra. Ez most a következő alakban áll elő [6]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V(x) - exE(t) \right] |\Psi(x, t)\rangle. \quad (19.)$$

Dolgozzunk atomi egységekben, azaz legyen $\hbar = 1, m_e = 1, e = 1$! Ezáltal az egyenlet:

$$i \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)\rangle = \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(x) - xE(t) \right] |\Psi(x, t)\rangle. \quad (20.)$$

A fenti egyenlet csupán az egy elektronra vonatkozó dinamikát tudja leírni. Bár a magasharmonikus keltés során rendszerint többelektronos atomokkal dolgozunk, a fenti egyelektron közelítésre (Single Electron Approximation) szorítkozunk.

(18.)-t M. Lewenstein és társai oldották meg elsőként, a következő három egyszerűsítő feltételezés segítségével, amit együttesen erőster közelítésnek (Strong Field Approximation) szokás nevezni [6].

- *Nincsenek belső rezonanciák*, vagyis az atomnak egy kötött állapota van, a $|0\rangle$. Ez akkor teljesül, ha $I_p \gg \hbar\omega$.
- *A közeg nem merül ki*, azaz az ionizáció nem túlságosan erős: $I_p < I_{\text{sat}}$, ahol I_{sat} a telítési intenzitás. Vagyis az elektronpopuláció a kötött állapotban marad mindig.
- *A trajektóriák szabadok*, vagyis a kontinuumbeli elektronokra nincs hatással az atomi potenciál. Ez fennáll, ha $I_p < 2U_p$.

Ahhoz, hogy ezen módszer segítségével megkapjuk a spektrumot, meg kell oldani az egyenletet $\Psi(x, t)$ -re, amiből a nemlineáris dipólmomentum a következő:

$$x(t) = \langle \Psi(x, t) | x | \Psi(x, t) \rangle. \quad (21.)$$

Ezt Fourier-transzformálva előáll $x(\omega)$, amiből a harmonikus emissziós ráta [7]:

$$W(\omega) \propto \omega^3 |x(\omega)|^2. \quad (22.)$$

A spektrumot a Feynman-féle pályaintegrál módszert követve határozzuk meg. Az elektron dipólmomentumának Fourier transzformáltja a következőképp írható fel [8]:

$$x(\omega) = \sum_s |x_s(\omega)| \exp[i\Phi_s(\omega)], \quad (23.)$$

ahol az s szerinti összegzés az adott energiához (körfrekvenciához) tartozó különböző komplex elektron kvantumpályákat jelöli, míg a dipólfázis az S kváziklasszikus hatás Legendre-transzformáltja, $A(t)$ pedig az $E(t)$ integráljának ellentétével egyenlő vektorpotenciál [6].

$$S_s(p_s, t_{i,s}, t_{r,s}) = \int_{t_{i,s}}^{t_{r,s}} \left(\frac{(p_s + A(t))^2}{2} + I_p \right) dt, \quad (24.)$$

$$\Phi_s(p_s, t_{i,s}, t_{r,s}) = \omega t_{r,s} - S_s, \quad (25.)$$

$$A(t) = - \int E(t) dt. \quad (26.)$$

Itt, és a továbbiakban $t_{i,s}$, $t_{r,s}$, illetve p_s rendre az s-edik elektronpályát jellemző ionizációs idő, rekombinációs idő, valamint kanonikus momentum, amit a sebességgel és a vektorpotenciállal definiálunk, továbbra is atomi egységekben:

$$p = v - A(t). \quad (27.)$$

Azon pályák valósulnak meg, amelyekre a hatás extrémális, tehát egyúttal azok, amelyeknél a dipólfázisnak szélsőértéke van. Ezek megkeresése a következő nyeregponti egyenletek megoldásával történik [6]:

$$0 = \frac{\partial \Phi_s}{\partial t_{r,s}} = \omega - \frac{[p_s + A(t_{r,s})]^2}{2} - I_p, \quad (28.)$$

$$0 = \frac{\partial \Phi_s}{\partial t_{i,s}} = \frac{[p_s + A(t_{i,s})]^2}{2} + I_p, \quad (29.)$$

$$0 = \frac{\partial \Phi_s}{\partial p_s} = p_s(t_{r,s} - t_{i,s}) + \int_{t_{i,s}}^{t_{r,s}} A(t) dt. \quad (30.)$$

A csatolt egyenletrendszer megoldása adott körfrekvenciához megadja az ionizációs és rekombinációs időket, illetve a kanonikus momentum értékét, melyekből a spektrum amplitúdója és fázisa számolható. Az első és a második egyenlet (aminek nincs valós megoldása) az energiamegmaradást fejezi ki a rekombináció és az ionizáció pillanatában, a harmadik egyenlet pedig azt a tényt fejezi ki, hogy a számba jövő trajektóriák a $(t_r - t_i)$ idő után visszatérő elektronokhoz tartoznak. A komplex idők az alagúteffektussal függnek össze, a valós rész fogja megadni a fizikai értelemben vett ionizációs, illetve rekombinációs időt.

Megmutatható [8], hogy $x(\omega)$ a következőképp áll elő:

$$x(\omega) = \sum_s \frac{i2\pi}{\sqrt{\det(S'')}} \left[\frac{\pi}{\epsilon + i(t_{r,s} - t_{i,s})} \right]^{\frac{3}{2}} E(t_{i,s}) \bar{d}[p_s + A(t_{r,s})] * \\ * d[p_s + A(t_{i,s})] \exp[i\Phi_s(\omega)], \quad (31.)$$

ahol $\det(S'')$ a hatás második deriváltjaiból készíthető mátrix determinánsa, ϵ egy kicsi pozitív regularizációs konstans, (hogy biztos ne osszunk nullával), d pedig a dipólmátrix eleme a kötött-szabad átmenetekre (a felírt összefüggés a hidrogénszerű atomok dipólmátrixára vonatkozik).

$$\det(S'') = \left[\frac{\partial^2 S}{\partial t_{i,s} \partial t_{r,s}} \right]^{\frac{3}{2}} - \frac{\partial^2 S}{\partial^2 t_{i,s}} \frac{\partial^2 S}{\partial^2 t_{r,s}}, \quad (32.)$$

$$d(p) = \langle p|x|0 \rangle = i \left(\frac{1}{\pi\alpha} \right)^{\frac{3}{4}} \frac{p}{\alpha} \exp\left(-\frac{p^2}{2\alpha}\right), \alpha = 0.8I_p. \quad (33.)$$

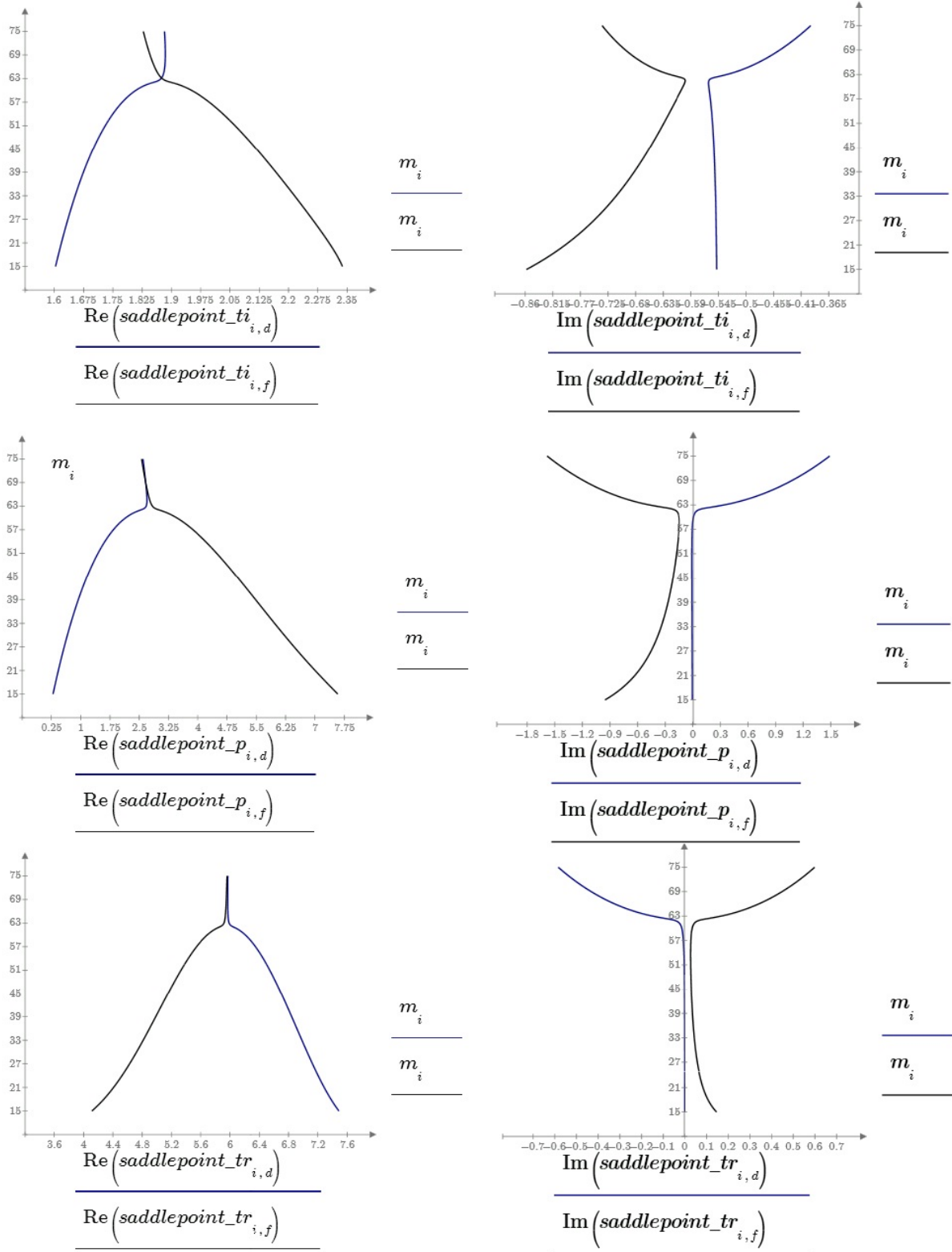
A (31.) összefüggés fizikailag interpretálható különböző folyamatokhoz tartozó valószínűségi amplitúdók összegeként [9]. Az elektron $t_{i,s}$ -kor $E(t_{i,s}) * d[p_s + A(t_{i,s})]$ valószínűségi amplitúdóval alagutazik a kontinuumba. Az elektron hullámfüggvénye ezután egészen $t_{r,s}$ -ig terjed, és egy fázisszorozót szerez, $\exp[i\Phi_s(\omega)]$ -t. A $t_{r,s}$ időpontban $\bar{d}[p_s + A(t_{r,s})]$ amplitúdóval rekombinálódik az ionnal. Az elektron hullámcsomag szétterjedésével járó csökkenő rekombinációs valószínűséget az fejezi ki, hogy a dipólmomentum Fourier-transzformáltja fordítottan arányos a repülési idő 3/2-ik hatványával. A spektrumot a (31.) egyenlet (22.)-be való helyettesítésével kaphatjuk meg. A (31.) összefüggés a megfelelője a klasszikus úton kapott amplitúdónak. Láthatjuk, hogy mindkét intuitív feltételezést visszaadja a kvantummechanikai leírás: az amplitúdó a repülési idő reciprokának valamely hatványával, illetve a térerősség ionizációbeli nagyságával arányos.

IV. Fél-quantummechanikai számítások

A nyeregponti egyenletek megoldásával elkészíthetjük az energia – visszatérési, illetve ionizációs fázis grafikonokat. Ezt megtehetjük úgy, hogy felírjuk a (28.)-(30.) egyenletrendszer, majd egy for ciklus segítségével különböző energiákon végighaladva megoldjuk egy beépített algoritmussal („Minerr” algoritmus). Az erőstér közelítésnél leírtak alapján az energiákat nem választhatjuk túl alacsonyra, mivel ott pontatlanná válik a modell. Ezért a 15.-től a 75.-ik harmonikus rendnek megfelelő energiákra kerestem a megoldásokat. Szükségünk van a vektorpotenciálra, ami $E=E_0\sin(\omega_0 t)$ térerősség esetén a következő:

$$A(t) = \frac{E_0}{\omega_0} \cos(\omega_0 t). \quad (34.)$$

Mivel több megoldás létezik, a „Minerr” algoritmus konvergálásához szükséges a kezdeti értékek megtippelése. Ebben lehet segítségünkre az, hogy feltételezve, hogy a klasszikus megoldás közel van a kvantummechanikaihoz, az idők valós részét az ott kapottakkal helyettesítjük. A képzetes részeket, illetve az impulzust jobb híján becsülnünk kell, de bízhatunk abban, hogy ha egy adott értéknél a megoldáspontok sorozataira illesztett függvények folytonosak, differenciálhatók, valamint hasonlóak a klasszikus megoldáshoz, akkor helyesek lehetnek. Ezzel a módszerrel külön-külön adódnak félperiódusonként a rövid és hosszú trajektóriák. Az első félperiódusra ily módon számított görbék láthatóak a *III.5. ábrán*.

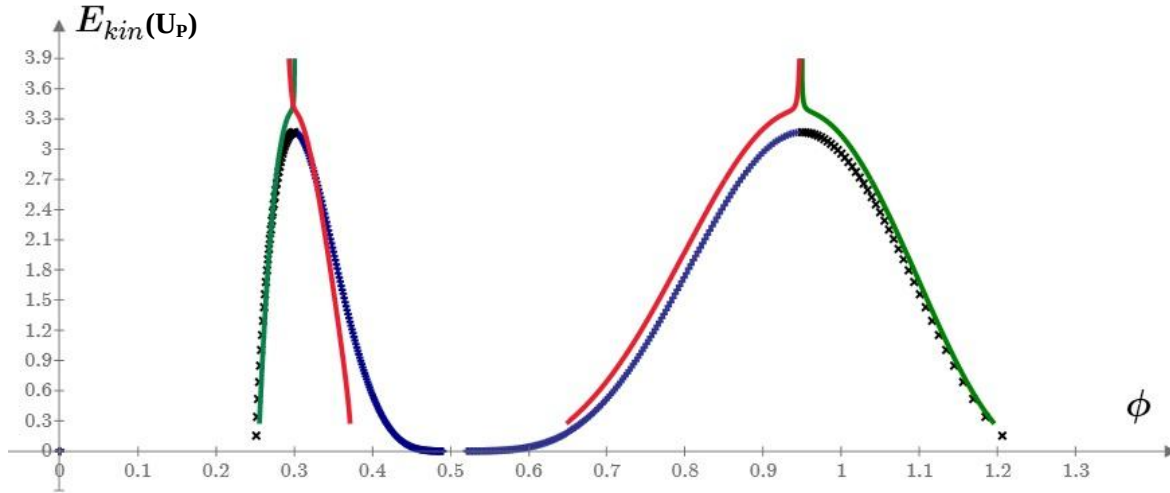


III.5.ábra: Monokromatikus lézertér energia-fázis, momentum-fázis diagramjai.

A jelöléssel kapcsolatban fontos kihangsúlyozni, hogy itt is pontsorozatot kapunk, de a későbbi spektrumszámításhoz igen sok pontra van szükségünk, ezért összeköthetjük a pontokat. A tengelyeken az egységeket az eddigiektől eltérően választottam. A spektrum analíziséhez érdemes az energiát m harmonikus rend egységeiben feltüntetni, azaz, hogy hányszorosa az

adott energia a lézerfoton energiájának. A vízszintes tengelyen a (11.) által definiált fázis 2π -szerese szerint ábrázoltam.

Ábrázoljuk egy grafikonon az energiákat a visszatérési, valamint az ionizációs fázisok valós részének függvényében; mind a klasszikus, mind a kvantumos megoldásokat figyelembe véve! Az eredmény a III.6. ábrán látható, úgy, hogy a III.2. ábra beosztásai szerint átskáláztam a nyeregpontri egyenletek megoldásait.



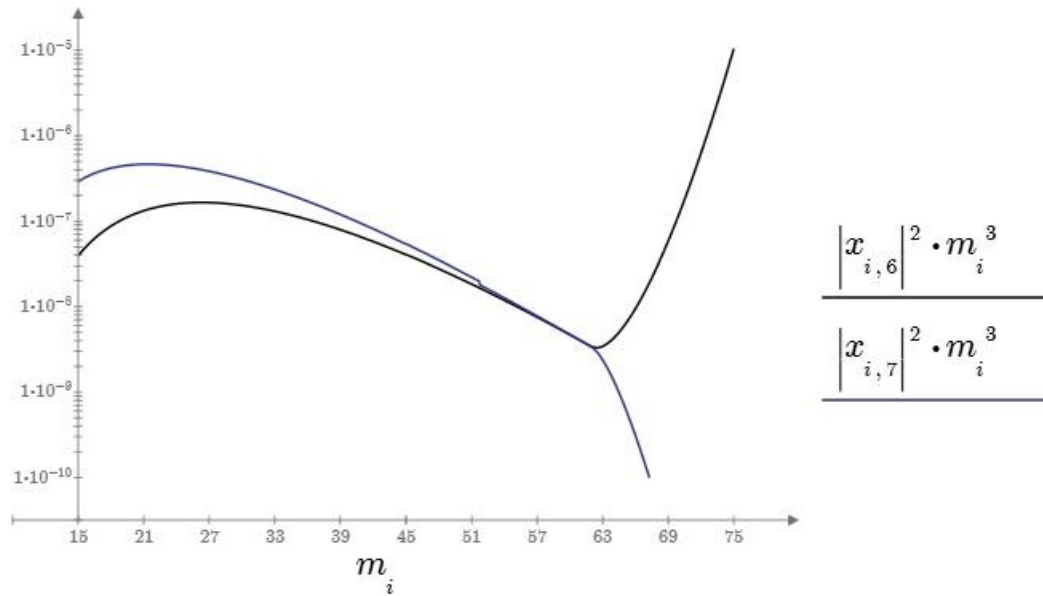
III.6. ábra: Monokromatikus tér klasszikus (szimbólumok) és fél-kvantummechanikai (folytonos vonal) energia-fázis grafikonjai

A grafikonon ugyanolyan színnel jelöltem az összetartozó ionizációs-rekombinációs fázisokat, az alsó pontsorozatok a klasszikus, a felső görbék a fél-kvantummechanikai modellből származó megoldások. A görbék alakja nagyon hasonló, az energia-visszatérési fázis görbe a rövid trajektóriák esetén gyakorlatilag azonos GDD-jű sugárzást szolgáltat, mivel a két megoldás párhuzamos. A legnagyobb különbség a maximális energiánál van, ugyanis a nyeregpontri egyenleteknek van megoldása a cut-offban is: minden energiához tartozik trajektória a cut-offban erősen csökkenő amplitúdóval. A cut-off pozíciójában is látjuk a különbséget. A klasszikus modell a cut-off pozícióját $I_p + 3.173U_p$ helyre teszi, míg a fél-kvantummechanikai leírás szerint ez $1.32I_p + 3.173U_p$ energiánál van [6]. Ezt a számolás valóban megerősíti: a második módon számolt cut-off a 63. harmonikus rendre esik, amit a III.9. ábrán be is jelöltem. Emlékeztetőül megjegyzem, hogy klasszikusan a cut-off az 59. harmonikusnál található.

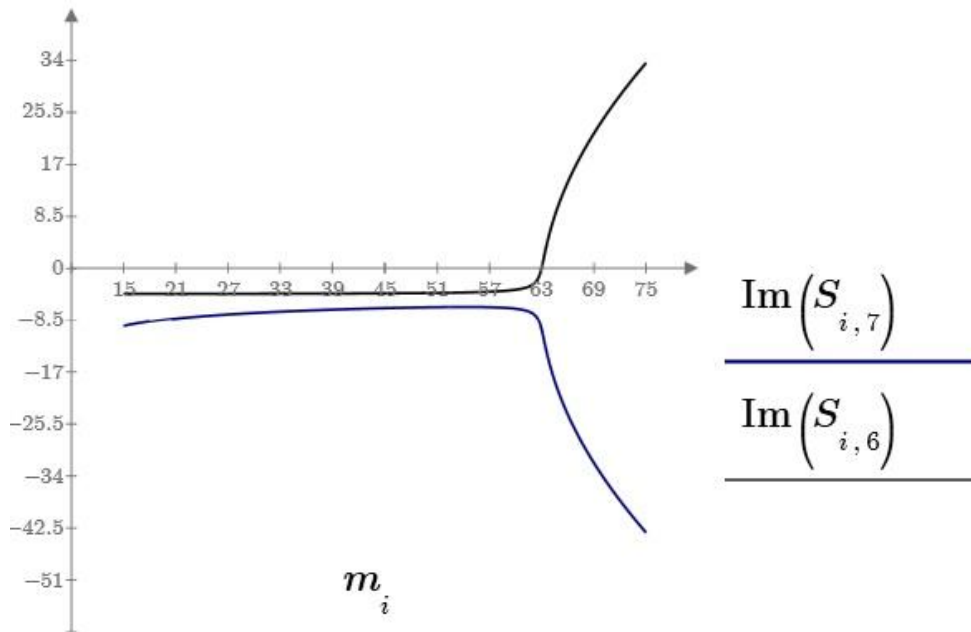
A (22.) és (31.) összefüggések segítségével számolt egy-egy hosszú (kék jelzés) és rövid pályákból (fekete) származó sugárzást láthatunk a III.7. ábrán. A rövid trajektóriákhoz tartozó megoldások valótlanná válnak a cut-off után nem sokkal, mivel az egyes hatások képzetes része itt pozitív lesz, tehát a harmonikus emisszióhoz való hozzájárulásuk elkezd a végtelenhez tartani. A spektrum számolásához nem szabad figyelembe venni ezeket a pontokat: célszerű ettől a ponttól kezdve ezen megoldásokat a hosszú trajektóriák megoldásával helyettesíteni.

3 optikai periódusra megoldva a nyeregpontri egyenleteket, lehetővé válik a spektrum elkészítése, mivel kellően sok adat áll rendelkezésünkre. Az összegzés elvégzése után (22.) és

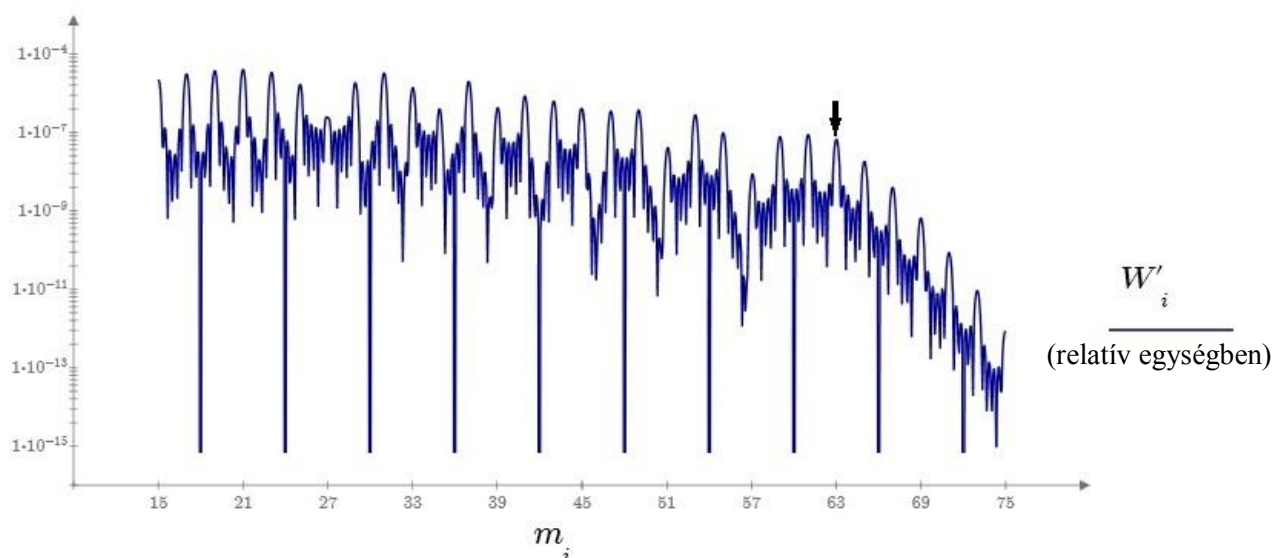
(31.) egyenletekkel meghatározhatjuk a spektrumot (III.9. ábra). Kialakul a közel azonos intenzitású plató, a spektrumban a csúcsok $2\omega_0$ távolságra helyezkednek el egymástól, és a nyíllal jelölt cut-off után gyorsan elkezd csökkenni az intenzitás.



III.7. ábra: Rövid (fekete szín), illetve hosszú trajektóriából (kék) származó sugárzás



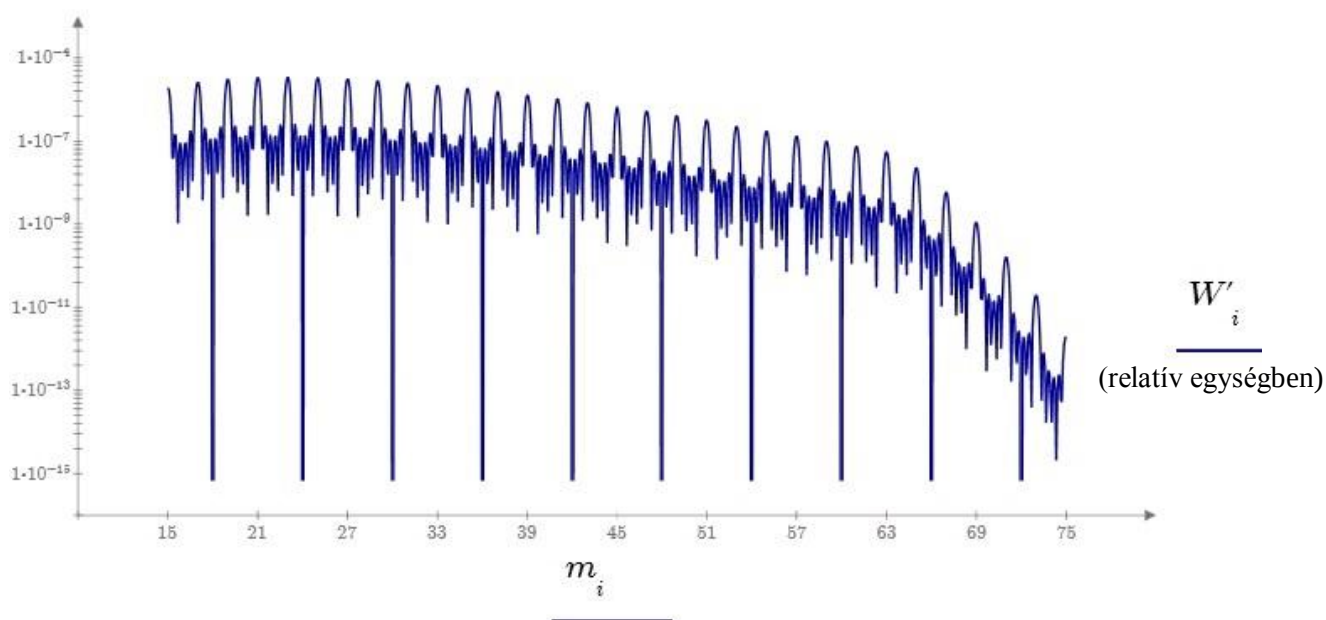
III.8. ábra: A hatás képzetes része pozitívvá válik a cut-offban a rövid trajektóriáknál.



III.9. ábra: Monokromatikus lézer által keltett magasharmonikus spektrum.

A nyíl a cut-off helyzetét jelöli $1.32I_p + 3.17U_p$ esetben.

A fázisillesztettségi tulajdonságaik miatt a rövid elektronpályák előnyösebbek a hosszúaknál [3], továbbá a hosszú trajektóriákból származó sugárzás sokkal divergensebb, ezért általában kísérletileg a rövid pályák által keltett sugárzás van jelen. Az így keletkező sugárzást láthatjuk a következő ábrán, ahol még a csúcsok magassága is sokkal szabályosabban alakul.



III.10. ábra: A rövid trajektóriákból származó sugárzás spektruma

IV. Fejezet

Összetett lézerterek összehasonlítása

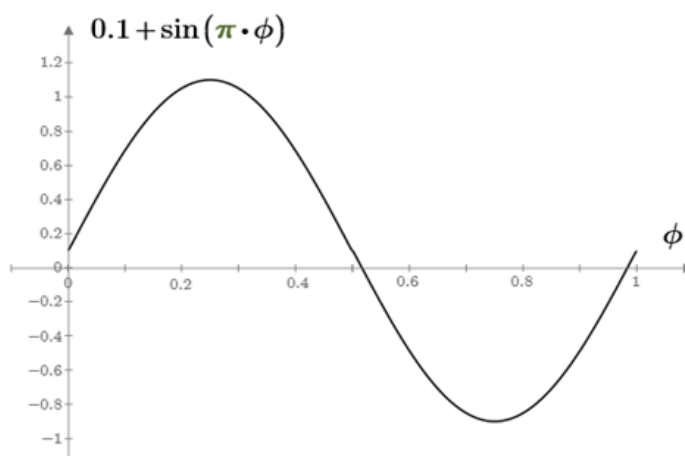
I. Monokromatikus tér DC tér jelenlétében

a) Klasszikus leírás

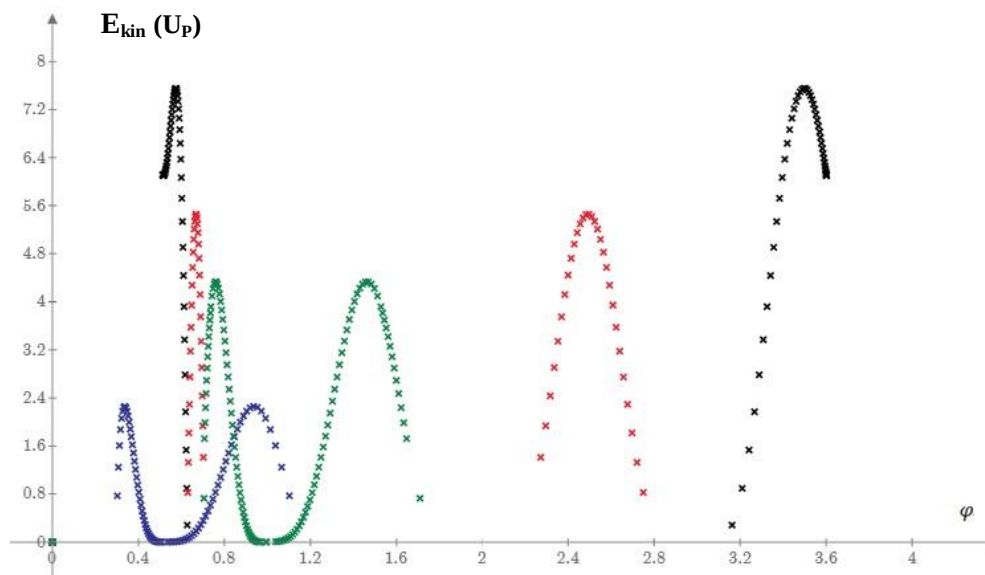
Ha a szinuszos térrel egyidejűleg egy sokkal hosszabb hullámhosszú (1mm-10 μ m, THz-es), kisebb intenzitású lézerimpulzust is a gázra fókuszálunk, a keltett magas harmonikus sugárzás tulajdonságai megváltoznak, ezáltal a tér hozzáadásával a keltett sugárzást tudjuk kontrollálni [10]. Mivel a szinuszos tér jellemzően 800 nm körüli, a THz tér 1-2 nagyságrenddel nagyobb hullámhosszú. Ha az infravörös tér egy periódusát vizsgáljuk, kezelhetjük úgy a folyamatot, hogy a monokromatikus térhez hozzáadunk egy – az amplitúdójánál valamelyest kisebb nagyságú – konstans nagyságú (DC) teret:

$$E = E_0 \sin(\omega_0 t) + \frac{E_0}{10}. \quad (35.)$$

Ez közelítőleg azt jelenti, hogy az egyik félperiódusban megnő a szinuszjel amplitúdója, a következőben pedig lecsökken, valójában mindkét irányban torzul a térerősség alakja. A térerősség időbeli lefutását láthatjuk a IV.1 ábrán, valamint a már leírt eljárással elkészített grafikonokat a IV.2, illetve IV.3 ábrákon.

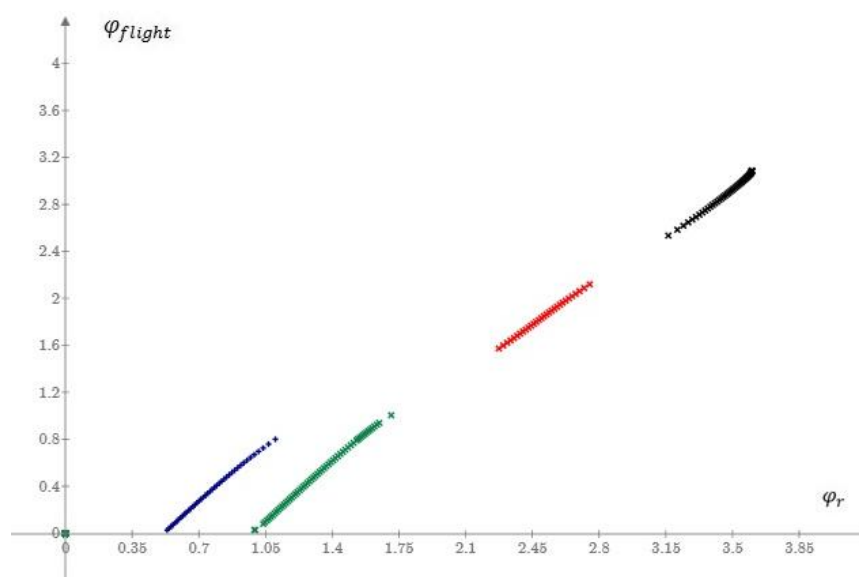


IV.1 ábra: Monokromatikus + DC tér időbeli alakja



IV.2 ábra: Az elektron mozgási energiája az ionizáció (baloldali pontsorozatok), illetve a rekombináció fázisának függvényében (jobb oldali pontsorozatok).

A 0,3T és 0,5T között átalagutazott elektronokhoz tartozik 0,5T és 1,1T közti visszatérési idő, azaz a 0 és 0,8T közti repülési idő. Ekkor a maximális energia valamelyest kisebb, mint a THz tér nélküli esetben. A 0,5T után ionizálódott elektronoknak azonban mindegyike visszatér, a 0,97T –vel bezárólag. Ezekhez kezdetben igen hosszú repülési idő, és nagy energia tartozik, amelyek az idő múlásával egyre kisebbek lesznek. Emlékeztetőül megismétlem, hogy a szinuszos tér esetében 0,25T-0,50T, illetve a 0,75T-T között ionizálódott elektronok térnek vissza.



IV.3 ábra: Az elektron repülési fázisa a visszatérési fázis függvényében

Az előző esethez képest ezt a jelentős eltérést a konstans tag a következőképp okozza: a szinuszos térben az elektron mozgása, mint láttuk, egy harmonikus oszcillálás és egy egyenes vonalú egyenletes mozgás összege.

$$x(t) = \frac{eE_0}{m\omega^2} [\sin(\omega_0 t) - \sin(\omega_0 t_i) - \omega_0(t - t_i) \cos(\omega_0 t_i)], \quad (36.)$$

ahol az első tag okozza az oszcillációt, a második egy konstans, ami egy irányban eltolja a kitérést, a harmadik pedig az egyenes vonalú egyenletes mozgás okozója.

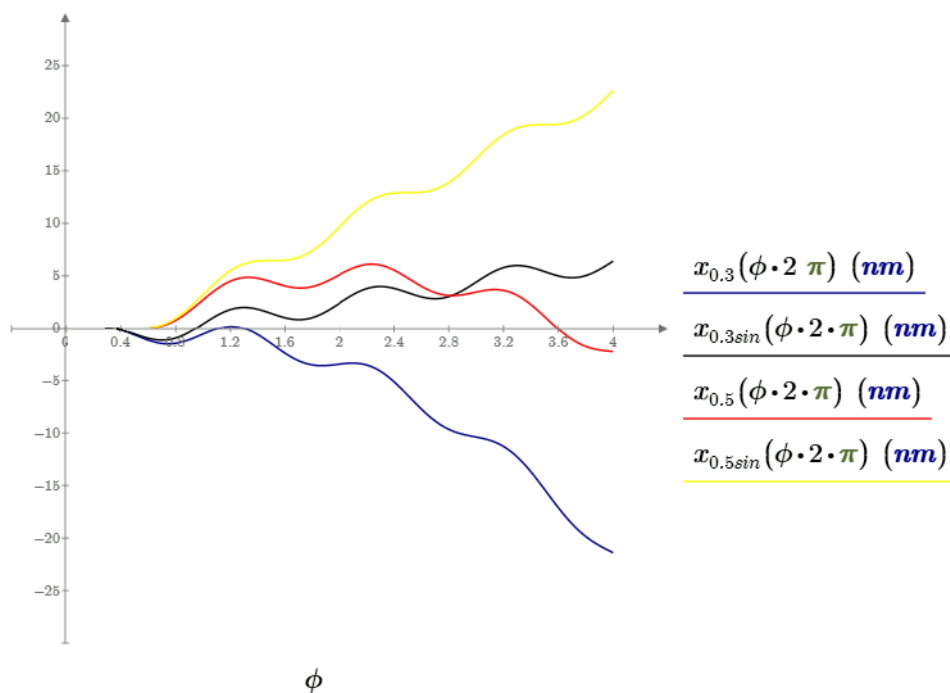
A kétszeri integrálás a DC térből viszont az eredeti oszcillálás mellé egy kvadratikust is ad, melynek előjele bizonyos esetekben a lineáris taggal ellentétes:

$$x(t) = -\frac{E_0 e}{m} \left[\frac{\sin(\omega_0 t_i) - \sin(\omega_0 t)}{\omega_0^2} + \frac{\cos(\omega_0 t_i) * (t - t_i)}{\omega_0} + \frac{(t_i - t)^2}{20} \right]. \quad (37.)$$

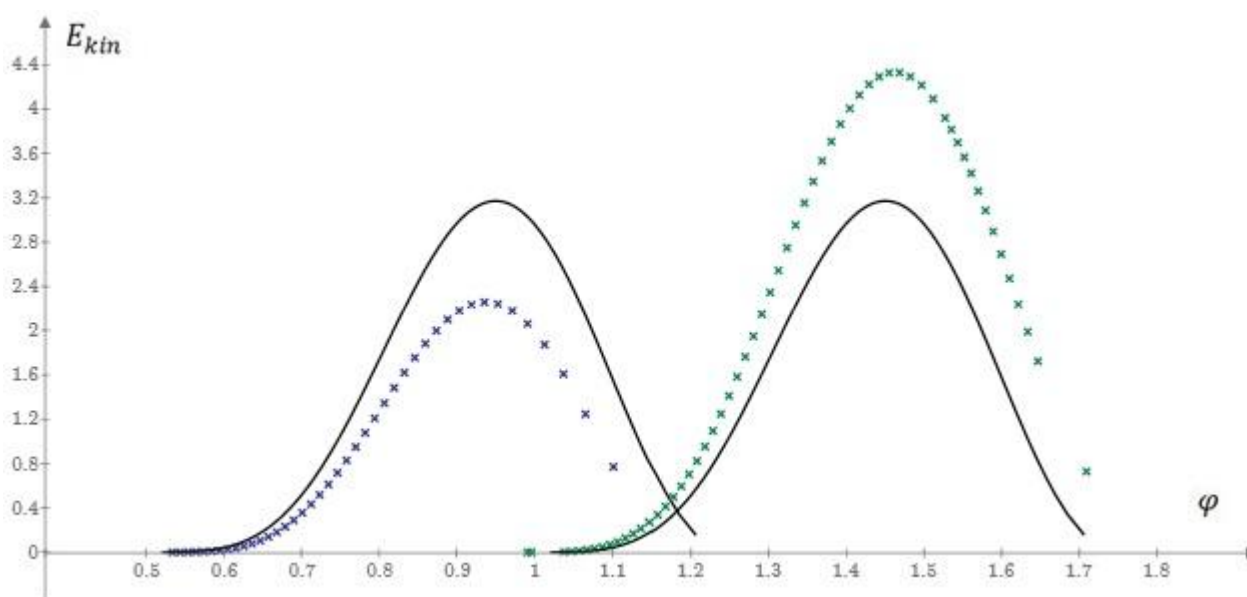
Ezt láthatjuk a *IV.4 ábrán*, ahol a kitérést szemléltettem a fázis függvényében. Az alsó indexben a szám azt jelöli, hogy milyen fázisban történt az ionizáció, a „sin” jelzés pedig arra utal, hogy a mozgás tisztán szinuszos térben történt-e, avagy jelen volt-e a DC tér is. Megfigyelhető, hogy a monokromatikus tér esetén az oszcilláció valóban egy-egy egyenesre tevődik rá, míg a THz-es esetben egy-egy parabolára. Ez a későbbi ionizációnál azt jelenti, hogy a trajektória, ami különben nem térne vissza, itt vissza fog térni, ugyan meglehetősen sokára, nagy sebességgel. Ahogy növeljük az ionizációs idő nagyságát, úgy lesz egyre kisebb a visszatérési energia, illetve a repülési idő. Az, hogy a *IV.2* és *IV.3 ábrákon* elkülönülnek egymástól a pontsorozatok, az annak a következménye, hogy a két nagyobb energiájú pontsorozat az ionizáció utáni 2. és 3. félperiódusban, míg a kisebb energiájú az ionizációt követő félperiódusban visszatérő elektronokat reprezentálja.

Azt látjuk, hogy egyes trajektóriákhoz igen hosszú visszatérési idő, és nagy energia tartozik. Az egzakt, kvantummechanikai leírás szerint ezen „pályák” matematikailag léteznek, ám mivel az elektront egy hullámcsomaggal írjuk le, ami az idő múlásával egyre jobban szétterjed, a rekombináció valószínűsége nagyon lecsökken, az elektron ezeknél a pályáknál sokkal kisebb amplitúdóval fogódik be. Azon trajektóriák, amelyekhez jelentős emisszió köthető, még 2T előtt térnek vissza. Ezeket külön kiemeltem a *IV. 5. ábrán*.

Várákozásunknak megfelelően azt tapasztaljuk, hogy a DC tér jelenlétében a folyamat már a teljes lézertér periódusával ismétlődik. Az egyik félperiódusban kibocsátott sugárzás levágása csökken, a másik periódusban közel ugyanekkora értékkel nő a tisztán szinuszos esethez képest.

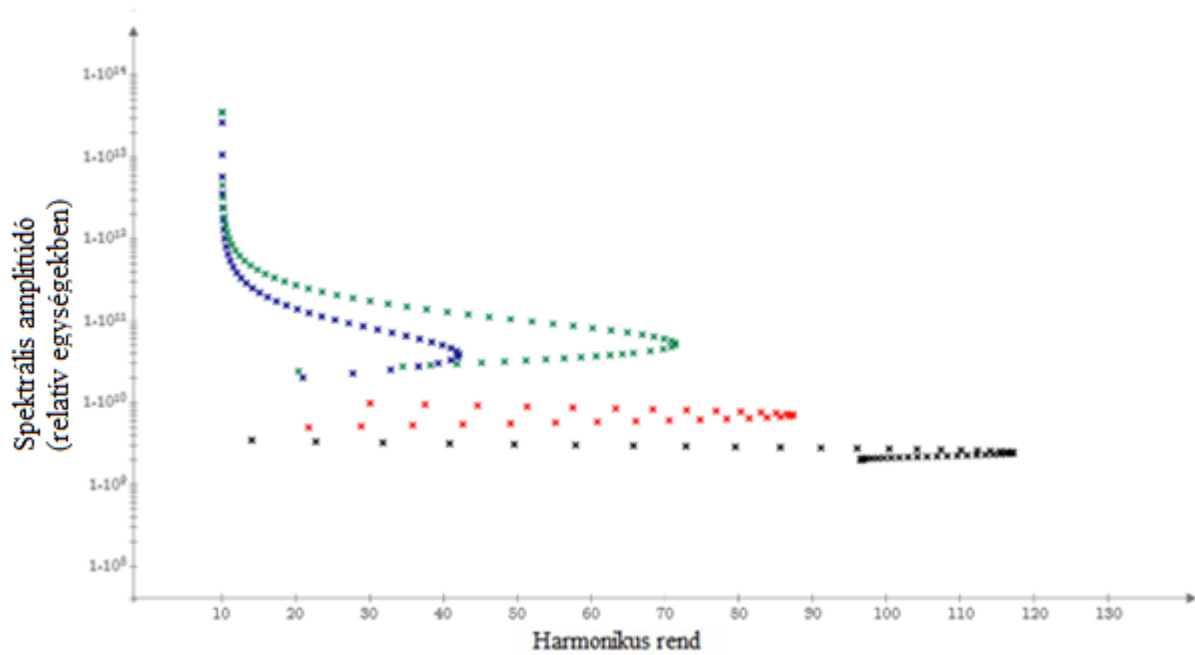


IV.4 ábra: Elektronpályák különböző terek és ionizációk esetén



IV.5 ábra: Visszatérési fázis-energia görbék tiszta monokromatikus tér esetén (fekete görbék), illetve a THz tér jelenlétében (kék, illetve zöld pontok)

Ahogy a monokromatikus térre elkészítettük a spektrális amplitúdót, úgy teljesen analóg módon el tudjuk készíteni erre a térre is. Az eredmény a IV. 6. ábrán látható.

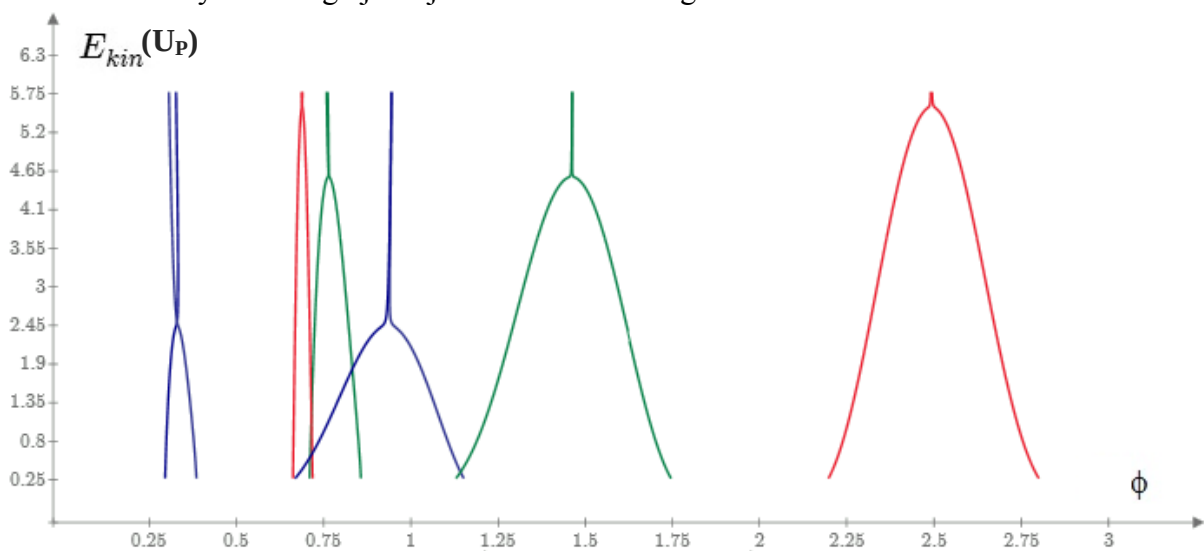


IV.6 ábra: Monokromatikus + DC tér spektrális amplitúdója. A színek a IV.2. ábrának megfelelők.

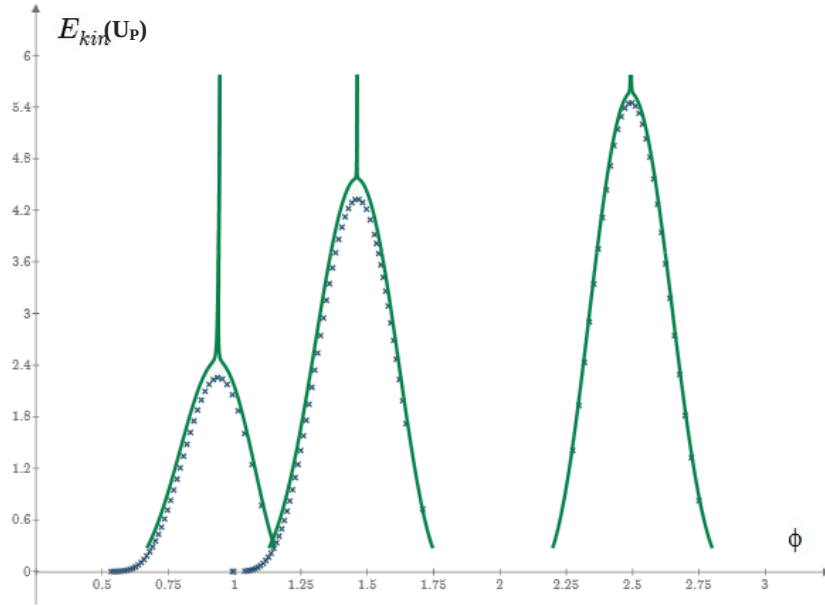
Ahogy azt vártuk, eredményül a spektrumban több cut-off is létrejön, és az intenzitás rohamosan csökken a visszatérési idő előrehaladtával.

b) Fél-kvantummechanikai leírás

Vizsgáljuk meg, hogy a nyeregponti egyenletek megoldásával keletkező visszatérési energia – fázis görbék mennyiben térnek el a klasszikus módszerrel kapottaktól! A számításokat a három alacsonyabb energiájú trajektória-családra végeztem el.

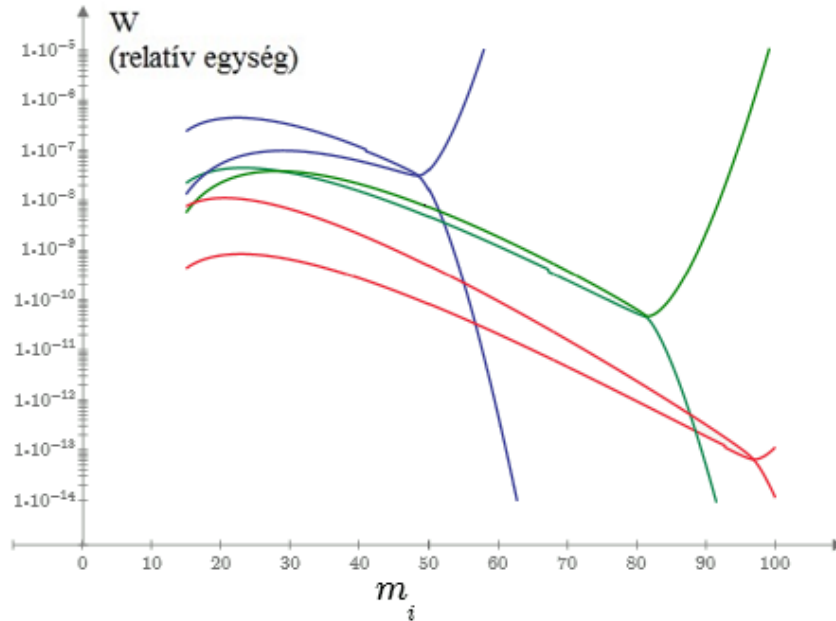


IV.7 ábra: Energia a fázis függvényében: azonos színnel jelöltük az összetartozó ionizációs-rekombinációs fázisokat. A színek a IV. 2. ábra jelöléseinek megfelelők.



IV.8 ábra: Energia a visszatérési fázis függvényében klasszikus és kvantumos számítással

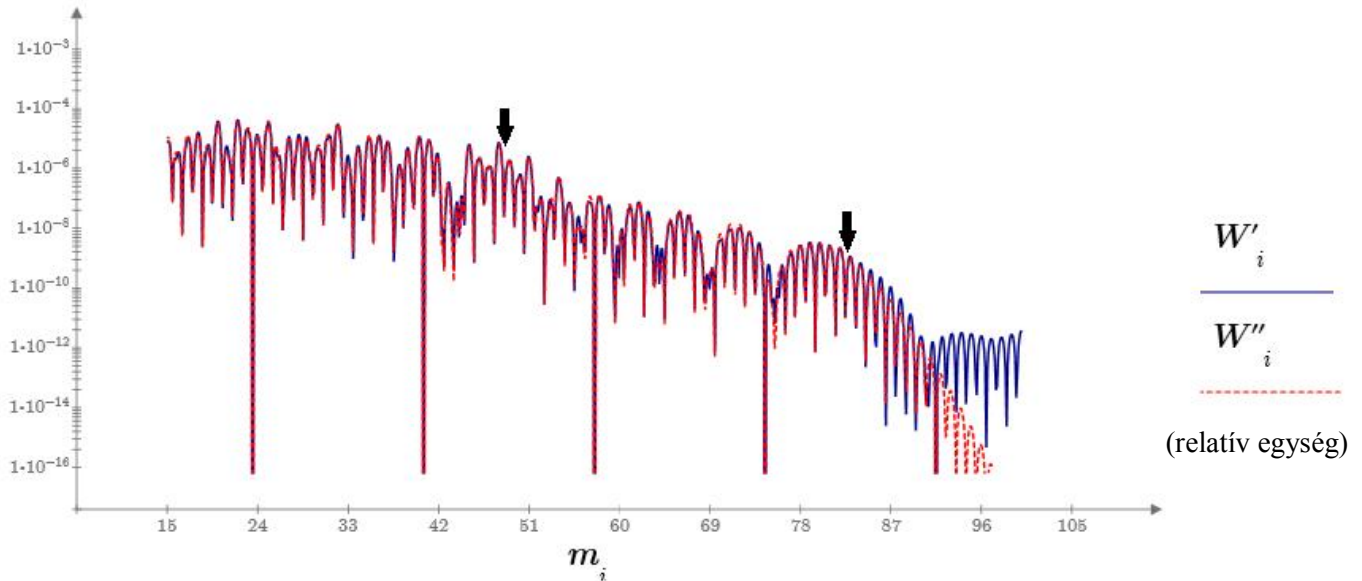
Láthatjuk, hogy mindhárom trajektória-család esetén igen hasonló lesz a két modellszámítás eredménye. A GDD-k között minimális az eltérés, a maximumok pedig igen hasonlóak. Az egyes esetekben keletkező sugárzás szintén az elvárás szerint alakul, (IV.9 ábra) a nagy repülési idejű elektronok sugárzása sokkal gyengébb lesz a lecsökkent rekombinációs amplitúdó miatt.



IV.9 ábra: Monokromatikus + DC tér által keltett sugárzás az első félperiódusban (kék), a második félperiódusban (zöld), valamint a superhosszú trajektóriák esetén (piros).

A 2 optikai periódusra vonatkozó összegzésből létrehozott spektrumon látható, hogy csak a nagyon magas harmonikusok tartományban van különösebb hatásuk, de ott is igen gyenge a keletkező sugárzás (IV.10 ábra). Több eltérés is van a spektrumban a monokromatikus esethez

képest. Egyrészt, megfigyelhetjük, hogy több levágás van a spektrumban, amiket már klasszikusan is megjósoltunk. Másrészt, a csúcsok periodicitása ω_0 -ra módosul.



IV.10 ábra: Monokromatikus + DC tér által keltett magas harmonikus sugárzás spektruma az extra hosszú trajektóriákkal (kék), illetve azok nélkül (piros).

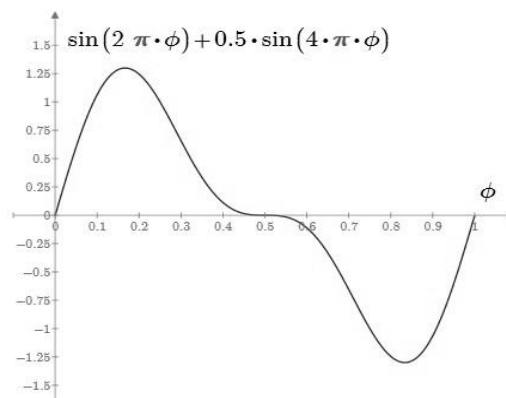
II. $\omega/2\omega$ tér

a) Klasszikus leírás

Vizsgáljuk meg, hogy mi történik, ha az eredeti szinuszos térerősség mellett egy másik kétszeres frekvenciájú, kisebb amplitúdójú szinuszos tér van jelen! Ezt a bikromatikus teret előszeretettel szokták használni, mivel elősegíti az izolált attoszekundumos impulzusok keltésének lehetőségét [11]. A térerősséget a következő kifejezéssel írhatjuk le:

$$E(t) = E_0 [\sin(\omega_0 t) + \theta \sin(2\omega_0 t + \varphi)], \quad (38.)$$

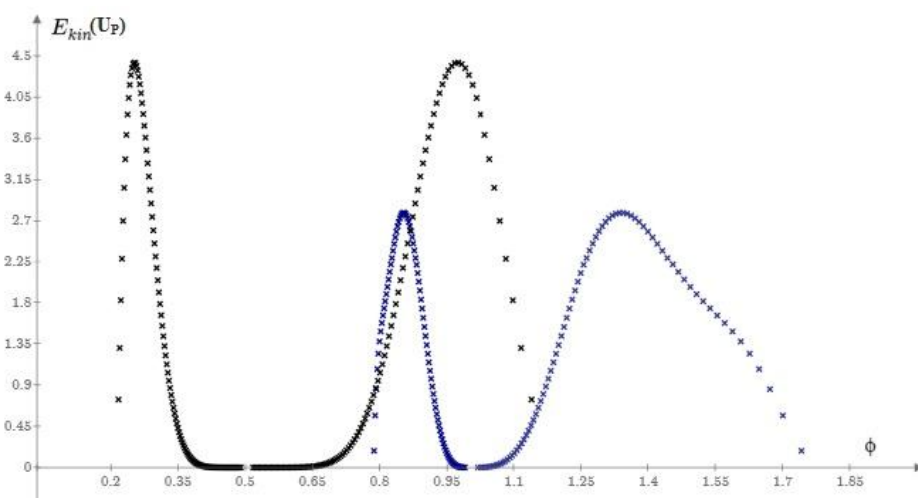
ahol θ a két térerősség relatív amplitúdója, φ pedig a relatív fázis.



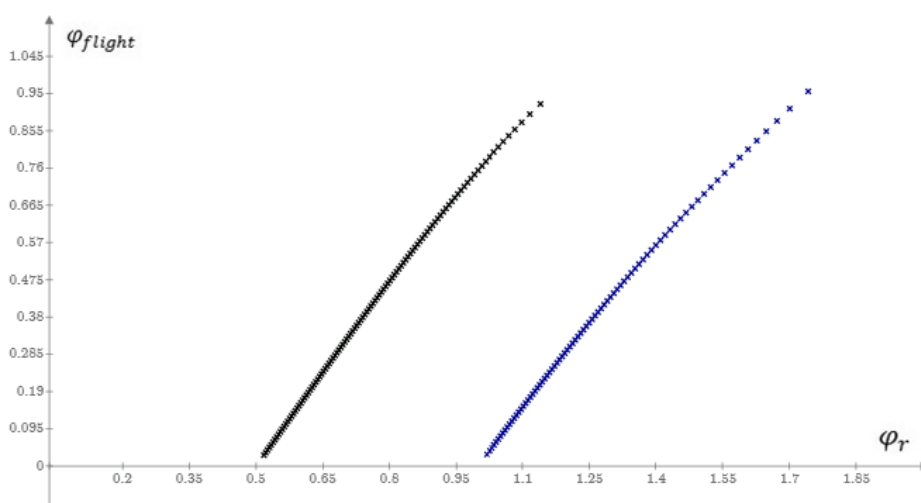
IV.11. ábra: $\omega/2\omega$ tér időbeli alakja

A már ismertetett számítási eljárással a IV.12 és IV.13 grafikonokat készítettem el, $\theta = 0,5$ és $\varphi = 0$ esetre.

A lényeges eltérés a monokromatikus térhez képest, hogy az egymást követő két lézer félsperiódusban a térerősség alakja – ezáltal az elektronpályák - különbözőek lesznek, mivel megszűnik az eltolás invariancia, ráadásul két cut-off frekvenciája is lesz a keletkező spektrumnak. Természetesen θ és φ változtatásával a grafikonok is változni fognak. Ha θ -t csökkentjük, csökkenni fog a különbség a két félsperiódus között is, közelebb kerül egymáshoz a két cut-off energia, ha pedig φ -t változtatjuk, meg fog változni a térerősség alakja, ezáltal a kibocsátott fény tulajdonságai, - mint például a csörpje, a spektrum szélessége - is változnak.

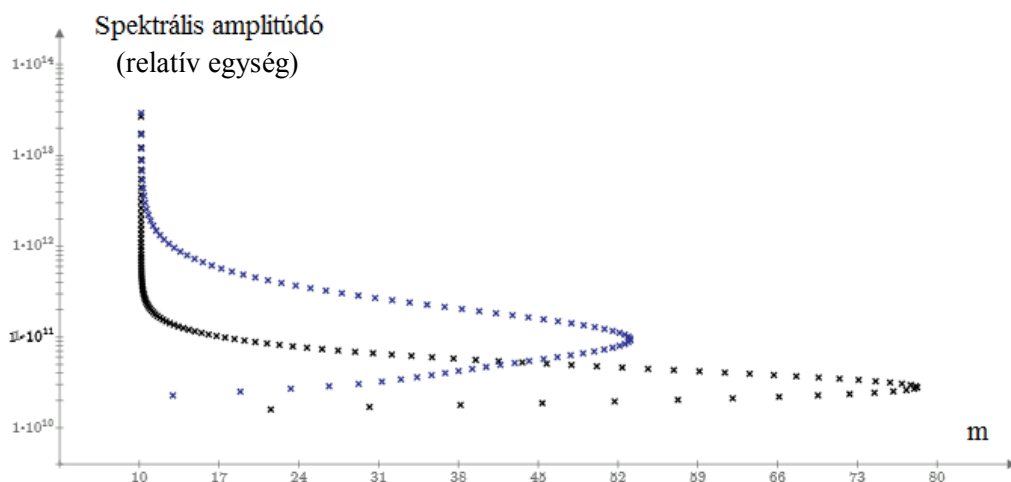


IV.12 ábra: $\omega/2\omega$ tér esetén az elektron kinetikus energiája az ionizációs, valamint a rekombinációs fázis függvényében. A fekete szín jelzi az első félsperiódusban, a kék a második félsperiódusban átalagutazott elektronokat.



IV.13 ábra: Elektron repülési fázisa a visszatérési fázis függvényében. A szín a IV.12 ábráéval egyezik meg.

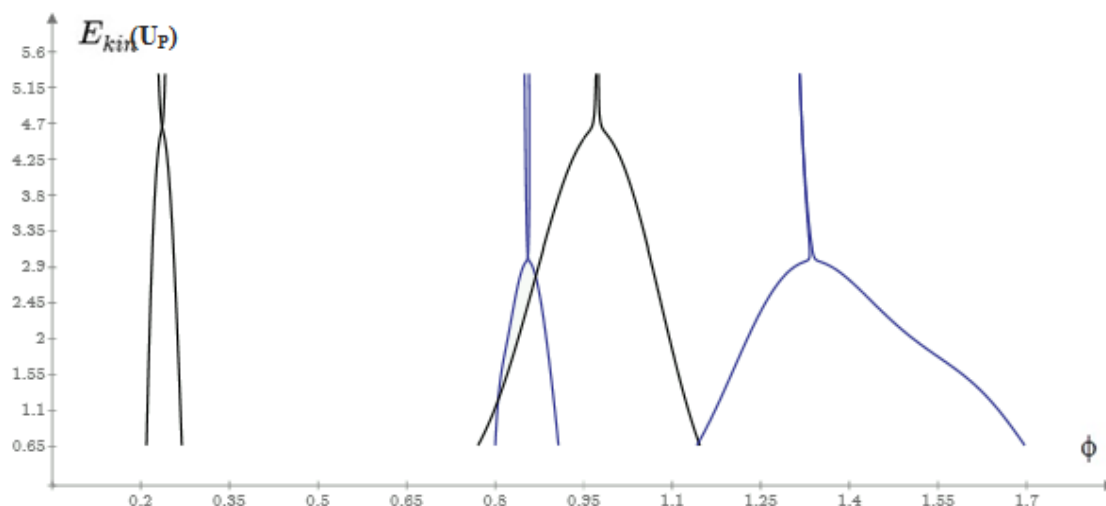
A spektrális amplitúdó frekvenciafüggése a IV. 14 ábrán látható. A két félderiodusban történt ionizációk eltérő intenzitású sugárzást hoznak létre, két cut-off keletkezik.



IV.14 ábra: Spektrális amplitúdó $\omega/2\omega_0$ tér esetén. A szín a 12. ábrával egyezik meg.

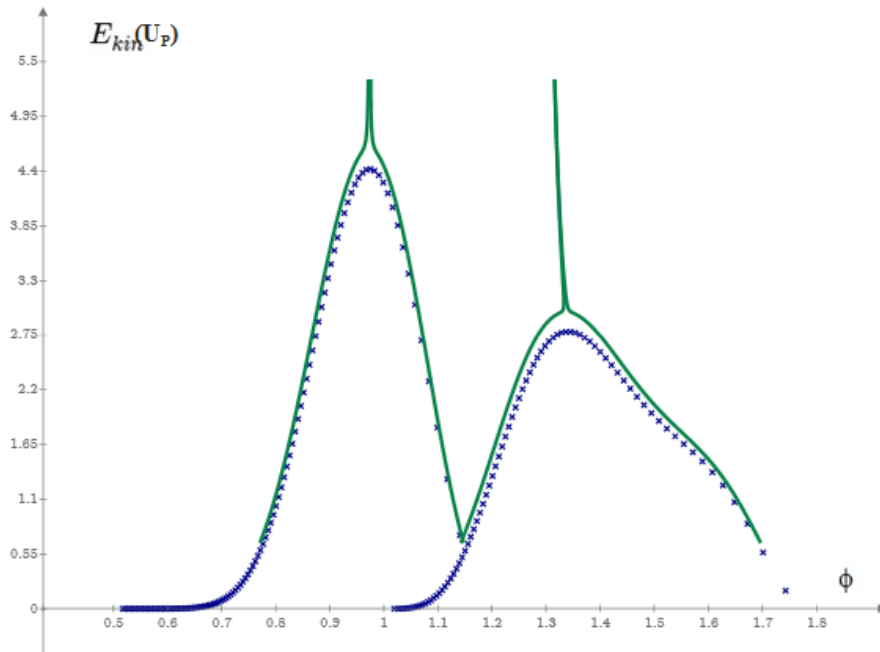
b) Fél-quantummechanikai leírás

Nézzük meg, hogy hogyan alakulnak a nyeregponti egyenletek megoldásával keletkező visszatérési energia – fázis görbék!



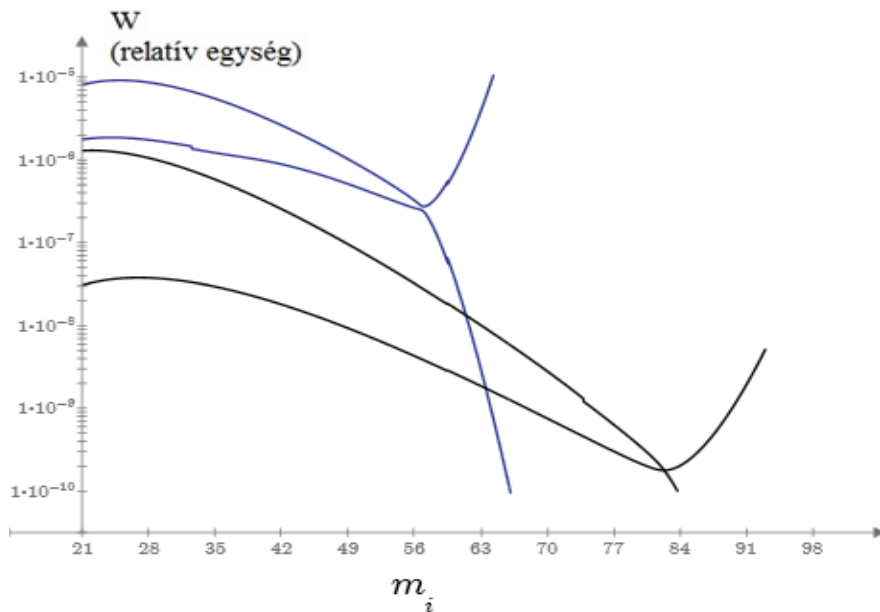
IV.15 ábra: Visszatérési energia – fázis görbék a nyeregponti egyenletek megoldásával

A IV.15 ábrán láthatjuk a fél-quantummechanikai számítás eredményét, a IV.16 ábrán pedig a klasszikus megoldással hasonlítottam össze az eredményeket. A korábbi megállapításaink helytállóak jelen tér esetén is: a két megoldás meredeksége ismét jól egyezik, egyedül a cut-offnál van számottevő eltérés, pontosan mint a korábbi esetekben.



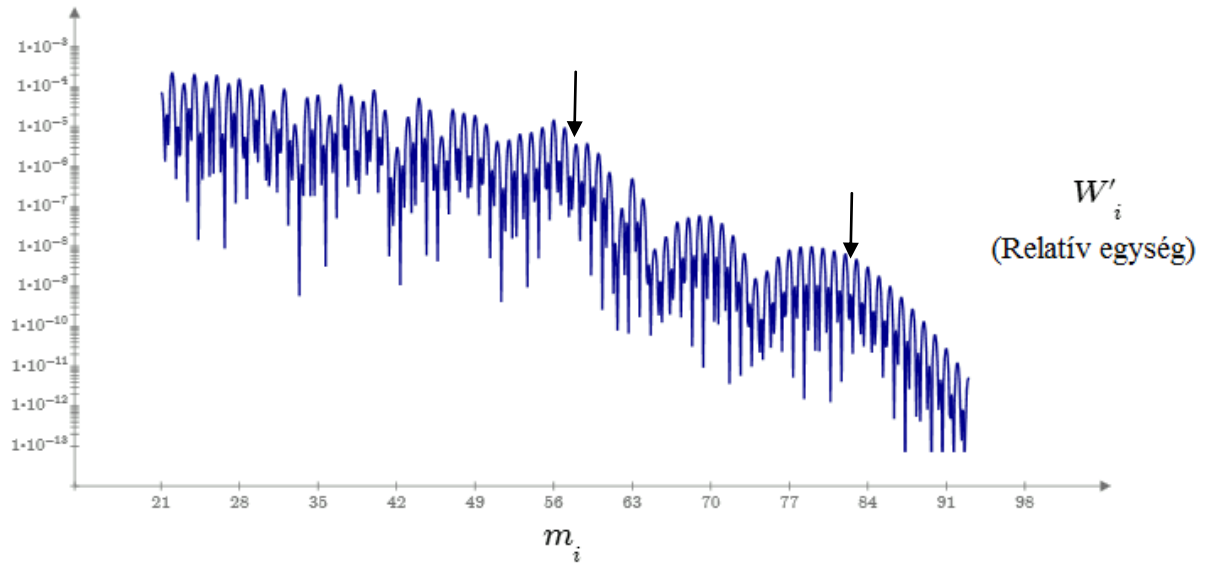
IV.16. ábra: A klasszikus és a fél-quantummechanikai megoldások összehasonlítása

A nyeregponti egyenletek megoldásából számolható sugárzás hasonló képet ad, mint a klasszikusan számolt spektrális amplitúdó, bár a klasszikus eredménynél nincs ekkora különbség a két sugárzás intenzitása között. Az első félperiódusban keletkező sugárzás kevésbé intenzív, ám távolabbi a cut-offja, mint a másodikban keletkezőé.



IV.17. ábra: $\omega/2\omega$ tér által létrehozott magasharmonikus sugárzás az első (fekete), illetve a második (kék) félperiódusra vonatkozóan.

Három optikai periódusra vonatkozó összegzésből a IV.18. ábrán látható spektrumot számoltam ki. Jól megfigyelhető a két cut-off, illetve az, hogy a spektrumban szintén ω periodicitásúak a csúcsok, hiszen a keltő tér megint a lézer teljes periódusa szerint ismétlődik.



IV.18. ábra: $\omega/2\omega$ tér által létrehozott magasharmonikus sugárzás spektruma. A nyilak a két kvantummechanikai módszerrel meghatározható cut-offot jelölik.

III. Ultrarövid lézerimpulzus

a) Klasszikus leírás

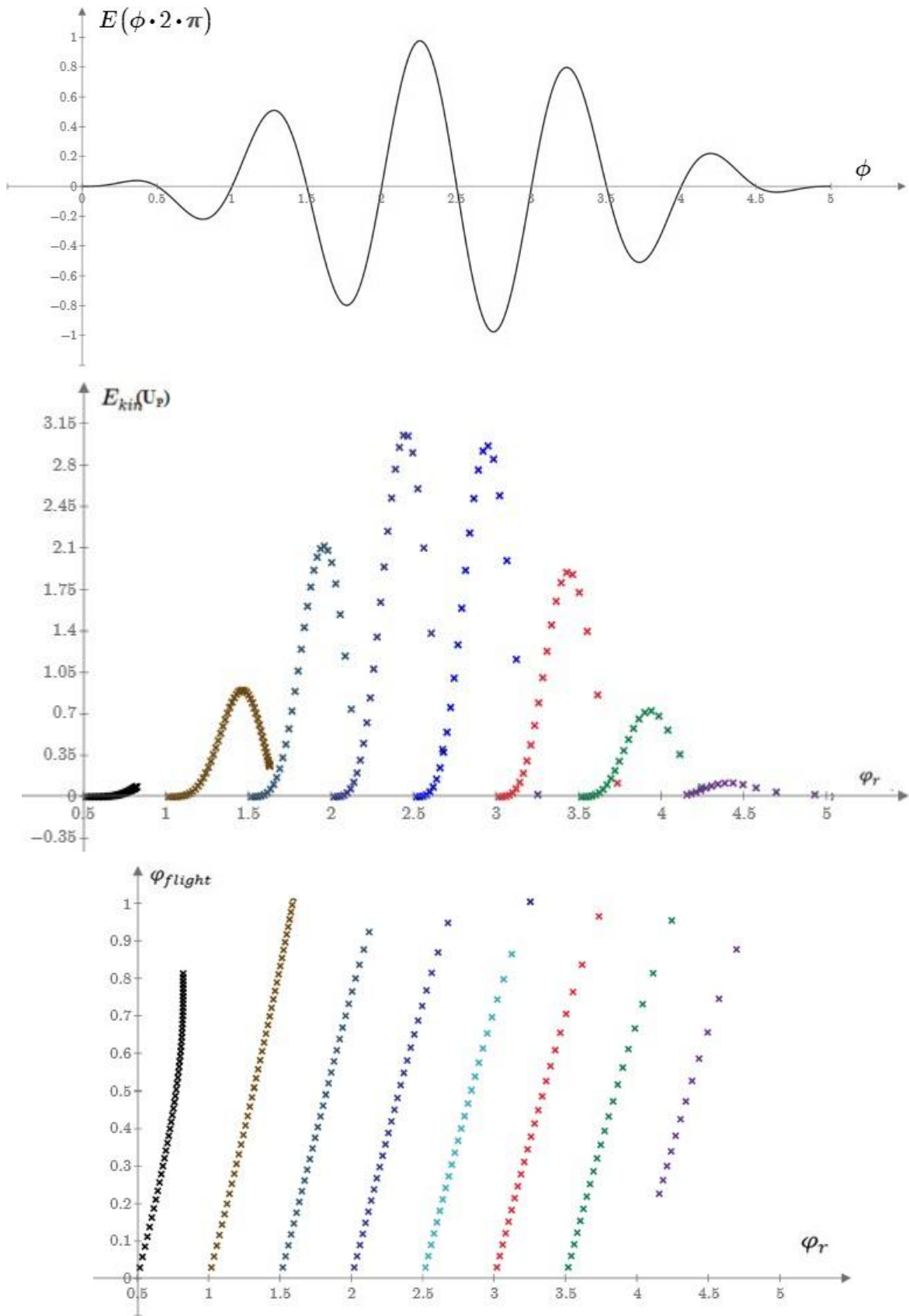
Mivel a gyakorlatban a megfelelő intenzitást ultrarövid lézerimpulzusok használatával érjük el, célszerű egy ilyen esetet is megvizsgálni. A térerősség burkolóját válasszuk $\sin^2$ alakúnak, ami a numerikus számítások elvégzése szempontjából annyiban előnyösebb a Gaussosnál, hogy véges intervallumon zérussá válik. Ekkor a térerősség:

$$E(t) = E_0 \sin(\omega_0 t + \phi) * \Lambda(t), \quad (39.)$$

aminek a burkolója:

$$\Lambda(t) = \sin^2\left(\frac{\omega_0 t}{2N}\right), \quad (40.)$$

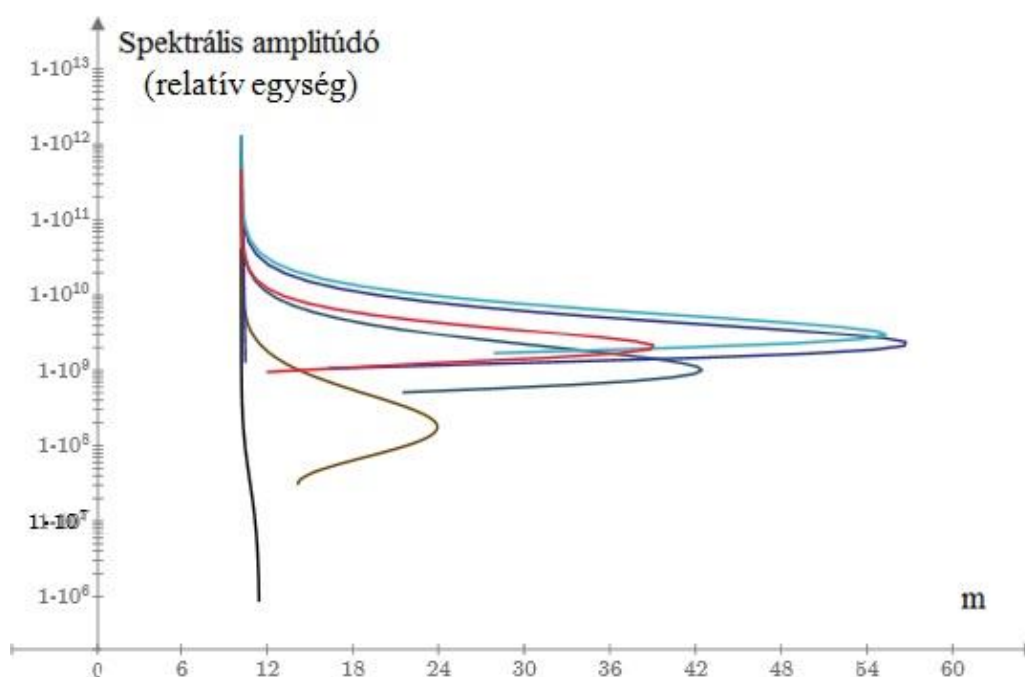
ha $t \in [0; 5T]$, különben pedig 0. N azt jelenti, hogy hány optikai ciklusból áll az impulzus, ϕ pedig a vivő-burkoló fázis (CEP). Az $N=5$, $\phi=0$ választással a térerősség, illetve az ehhez rendelhető visszatérési idő-energia, visszatérési idő-repülési idő grafikonok a következők lesznek.



IV.19, 20, 21 ábra: ultrarövid lézerimpulzus alakja, illetve az ez esetben ionizálódott elektronok kinetikus energiája, valamint repülési fázisa a visszatérési fázis függvényében. Azonos színnel jelöltem az összetartozó trajektóriákat.

A visszatérési energiák kisebbek lesznek az impulzus elején és végén, aminek az oka, hogy a térerősség csúcértéke azokban a félpériódusokban lényegesen kisebb, így kisebb az elektron ponderomotoros energiája is. A repülési idők azonban közel azonosak a szinuszos tér egyes félpériódusaiban. Ezt azzal magyarázhatjuk, hogy a leghosszabb trajektóriák is visszatérnek egy perióduson belül, a burkoló pedig csak lassan változik az egyes félpériódusok között. A látványosabb eltérés az első és utolsó ágnál figyelhető meg, de ez szintén érthető a térerősség alapján, ugyanis itt a legnagyobb a monokromatikus tértől az eltérés.

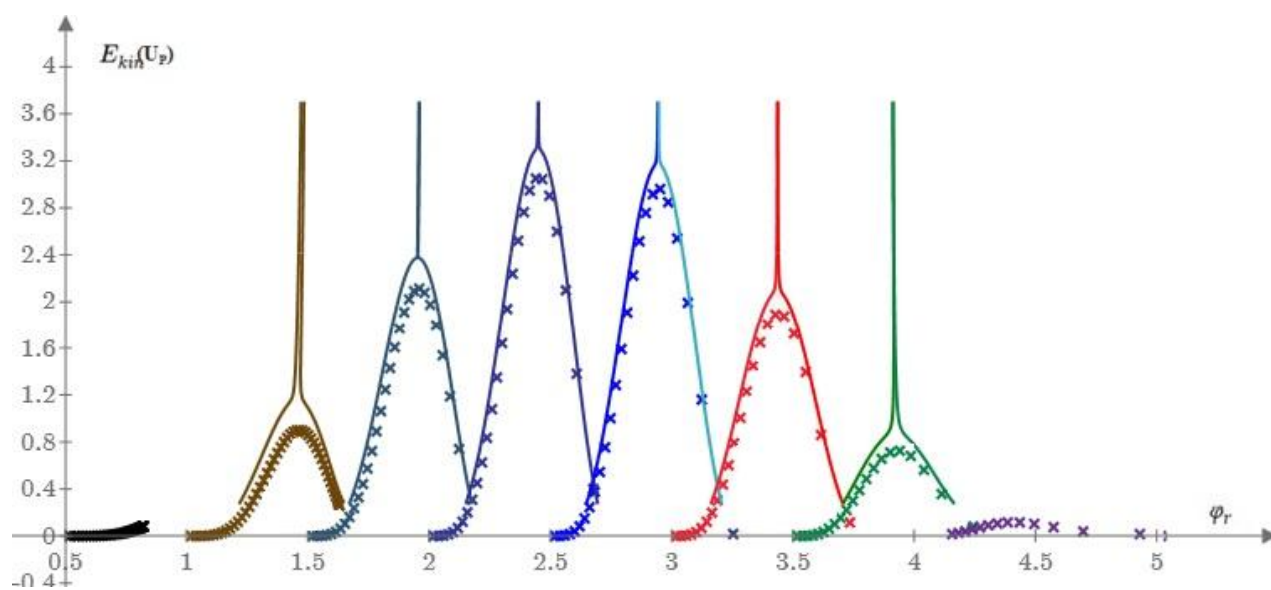
A spektrális amplitúdót a IV.22. ábrán láthatjuk, amit az eddigiekhez teljesen hasonló módon készítettem el. Látható, hogy a spektrum intenzívebb komponensei azokhoz a trajektóriákhoz tartoznak, amelyek a térerősség maximuma közelében léteztek.



IV.22 ábra: Ultrarövid lézerimpulzus spektrális amplitúdója. A színjelölés megegyezik az előbbi ábrákéval.

b) Fél-kvantummechanikai leírás

A számolás az előzőekhez hasonlóan történik itt is. Megkeressük az egyes félpériódusokban a rövid és a hosszú trajektóriákhoz tartozó nyeregponti egyenletek megoldásait, amikből aztán elkészíthetjük az energia-fázis diagramokat. A IV.23. ábrán láthatjuk az összehasonlítást: az egyes megoldások a már említett viszonyokban állnak egymással, az egyezés ismét kiváló.



IV.23 ábra: A klasszikus és a kvantummechanikai megoldások.

Összegzés

A dolgozatban monokromatikus, illetve összetett lézerterek által keltett magas harmonikus sugárzás tulajdonságait számítottam ki. Mindegyik lézertérre kétféle modellszámítást végeztem: az egyiket a klasszikus háromlépcsős modell segítségével, a másikat a fél-kvantummechanikai nyeregponthoz tartozó egyenletek analízisével. A következő eredményeket értem el:

- Az egyes esetekben keltett sugárzások frekvenciamodulációja közel ugyanolyannak adódott mindkét modellel számolva. A GDD $0,1 \text{ fs}^2$ nagyságrendű.
- A legnagyobb harmonikus rendje hasonló mindkét modellel számolva. Ez a különböző terek esetén 60-90 közöttinek adódik, ha az intenzitás $4 \cdot 10^{14} \text{ W/cm}^2$, és argongázban történik a keltés.
- Valószínűségi amplitúdót sikerült rendelni a klasszikus eredményekhez, ezáltal intuitív megfontolásokkal következtetni tudtam a kialakuló spektrumra. A létrehozott kvázi-spektrumok hasonló lefutásúak lettek, mint a nyeregponthoz tartozó egyenletek megoldásából számolható spektrumok.

Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretném köszönetemet kifejezni témavezetőmnek, Dr. Geretovszkyné dr. Varjú Katalinnak hasznos tanácsaiért, türelméért, a programok megírásában, valamint a dolgozat elkészítésében nyújtott segítségéért.

Köszönöm családomnak, páromnak, barátaimnak és szaktársaimnak, hogy támogatták munkámat.

1. Függelék

A következőkben tételesen bemutatom azon saját kutatási feladataimat, eredményeimet, amelyekből elkészítettem a dolgozatot.

- A magas harmonikus keltés elméleti modelljeit tanulmányoztam, áttekintettem a hazai és külföldi szakirodalom fontosabb, a téma alapjait leíró szakirodalmát.

- Feladatomból volt különböző időbeli lefutású lézerterek által keltett magas harmonikus sugárzás tulajdonságainak kiszámítása. A klasszikus és fél-kvantummechanikai (félklasszikus) modell segítségével meghatároztam a legmagasabb harmonikus rendjét, vagyis a levágás helyét, illetve megvizsgáltam a keletkező sugárzás GDD-jét. Mindezt monokromatikus (ω), $\omega+2\omega$, monokromatikus (ω)+DC terek, illetve egy $\sin^2$ burkolójú, ultrarövid lézerimpulzus esetében tettem. A kapott eredmények kifejezetten hasonlóak lettek a két modellel számolva, illetve összhangban vannak a korábbi elméleti eredményekkel.

- Fél-kvantummechanikai eszközökkel kiszámoltam a monokromatikus (ω), $\omega+2\omega$, valamint monokromatikus (ω)+DC tér által keltett sugárzás spektrumát. Az eredmények szintén összhangban vannak a korábbiakkal.

- A klasszikus leírást továbbgondolva, intuitívan spektrális amplitúdót rendeltem a keletkező sugárzáshoz. Az így kapott görbék hasonlóak lettek a kiszámított spektrumok burkolójához, és szemléletesen megmagyarázzák a plató kialakulását, ami a spektrum legfontosabb része az attoszekundumos impulzuskeltés szempontjából.

- A számolásaimat MathCad Prime 3.0 komputeralgebra programban végeztem. A klasszikus számításokhoz önállóan írtam egy programot, a félklasszikushoz a témavezetőm egy korábbi programját dolgoztam át. A klasszikus számításokhoz használt program a különböző ionizációs idők által meghatározott trajektóriákhoz keres zérushelyeket, és azok alapján számol kinetikus energiát, illetve egyéb jellemzőket. A fél-kvantummechanikai esetre írt program a nyeregpontri egyenleteket oldja meg különböző energiákra, az alkalmas kezdeti értékek megadása után. Ezeket a kezdeti értékeket a klasszikus számításból becsültem meg. A klasszikus spektrális amplitúdó meghatározásához az egyes megfontolások alapján írtam egy programot, ami elkészíti a korábban klasszikusan kiszámolt adatsorokból a grafikonokat. A fél-kvantummechanikai spektrumokat a nyeregpontri egyenletek megoldásából, a Lewenstein-féle elmélet alkalmazásával kaptam meg, szintén egy általam írt program segítségével.

Források

- [1] Krausz Ferenc: „From femtochemistry to attophysics”, *Physics World* (2001/09) 41.
- [2] Johan Norin: *Characterisation and Applications of Ultrashort Extreme Ultraviolet Pulses*, Doctoral Thesis (2002)
- [3] Varjú Katalin: „Attoszekundumos impulzusok”, *Fizikai Szemle*, 87. (2008/03)
- [4] Katalin Varjú, Per Johnsson, J. Mauritsson, Anne L’Huillier, R. López-Martens: „Physics of attosecond pulses produced via high harmonic generation”, *American Journal of Physics*, **77**, 389 (2009)
- [5] J.-C. Diels, Wolfgang Rudolph: „Ultrashort Laser Pulse Phenomena” 2. kiadás, Academic Press, (2006)
- [6] M. Lewenstein, Ph. Balcou, M. Yu. Ivanov, Anne L’Huillier, P. B. Corkum: „Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields”, *Physical Review A*, **49**, 2117 (1994)
- [7] D. B. Milosevic, W. Becker: „Role of long quantum orbits in high-order harmonic generation”, *Physical Review A*. 66, 063417, (2002.)
- [8] P. Salières, B. Carré, L. Le Déroff, F. Grasbon, G. G. Paulus, et al.: „Feynman’s Path-Integral Approach for Intense-Laser-Atom Interactions”, *Science* **292**, 902, (2001)
- [9] N. B. Delone, V. P. Krainov: „Atoms in Strong Fields”, Springer-Verlag, Heidelberg, (1985)
- [10] Emeric Balogh, Katalin Kovács, Péter Dombi, József A. Fülöp, Győző Farkas, János Hebling, Valer Tosa, Katalin Varjú: „Single attosecond pulse from terahertz-assisted high-order harmonic generation”, *Physical Review A*, **84**, 023806 (2011)
- [11] J. Mauritsson, P. Johnsson, E. Gustafsson, A. L’Huillier, K. J. Schafer, M. B. Gaarde: „Attosecond pulse trains generated using two color laser fields”, *Physical Review Letters*, **97**, 013001 (2006)
- [12] G. Sansone, C. Vozzi, S. Stagira, M. Nisoli: „Nonadiabatic quantum path analysis of high-order harmonic generation: Role of the carrier-envelope phase on short and long paths”, *Physical Review A*, **70**, 013411 (2004)