

SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI ÉS INFORMATIKAI KAR
FIZIKAI INTÉZET
ELMÉLETI FIZIKAI TANSZÉK

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI DOLGOZAT

**Egydimenziós atomi modellpotenciálok az attoszekundumos
fizikában: optimalizálás a HHG-spektrum számítására**

Készítette:

Sallai Krisztina, Fizikus MSc szakos hallgató

Témavezetők:

Dr. Czirják Attila

tudományos munkatárs, SZTE TTIK, Elméleti Fizikai Tanszék

Dr. Hack Szabolcs

tudományos munkatárs, ELI-ALPS

Szeged, 2022

Tartalomjegyzék

Bevezetés	3
1. Femtoszekundumos lézerimpulzus és atomi elektron kölcsönhatása	5
1.1. Az optikai alagúteffektussal történő ionizáció elméleti alapjai, a Keldysh-elmélet	5
1.2. Lineárisan polarizált ultrarövid impulzus és atom kölcsönhatásakor lehetséges folyamatok	7
1.3. Lézertér és atom kölcsönhatásának leírásakor használt modellek	8
1.4. Magasrendű felharmonikusok keltése intenzív lézertérben	10
2. Intenzív lézertérrel kölcsönható atomi elektron kvantumdinamikája	11
2.1. A háromdimenziós rendszer	11
2.2. Az egydimenziós Schrödinger-egyenlet megoldása	12
3. Magasrendű felharmonikus spektrum különböző modellpotenciálok esetén	14
3.1. Modellpotenciálok	14
3.2. A módosított soft-Coulomb-potenciál és Dirac-delta-potenciál súlyozott összege	17
3.3. A soft-Coulomb-potenciál és Dirac-delta-potenciál súlyozott összege	17
3.4. A soft-Coulomb-potenciál és a módosított soft-Coulomb potenciál kombinálása	20
4. Összefoglalás és kitekintés	27
Hivatkozások	30

Bevezetés

Megfelelően nagy intenzitású lézerimpulzus hatására egy atom alagúteffektus révén is ionizálódhat, az így kiszabadult elektron a lézerimpulzusból energiát nyerve visszatérhet az ionhoz és rekombinálódhat, ekkor az ionizációs energiájánál jóval nagyobb energiájú fotont bocsát ki [1, 2]. Ez a folyamat az alapja a nemesgázokban történő magasharmonikus-keltésnek (angolul High-Order Harmonic Generation, röviden HHG). Ennek a folyamatnak a pontos kvantumfizikai szimulációja az attoszekundumos fizika fontos és komoly kihívást jelentő területe, ugyanis ekkor az atomi elektron kvantumdinamikájának leírására a perturbációs számítás már nem alkalmazható. Többelelektronos atomokra a legpontosabb számítások is csak közelítő modellekkel lehetségesek, de egyelektronos esetben is nagy numerikus erőforrás igényűvé válhat a szimuláció. A lézerimpulzus központi hullámhosszának növelésével ugyanis egyre nagyobb szimulációs térre van szükség, így gyorsan nő a térbeli rácspontok száma, ezzel pedig a számítási igény is. Ezért fontosak az olyan redukált dimenziós modellek, amelyek hatékonyan csökkentik a szimulációk "numerikus költségét", de megőrzik a valódi folyamat lényeges sajátosságait. Lineárisan polarizált lézerimpulzus esetén a dinamika igazán fontos része a lézerimpulzus elektromos terének irányával párhuzamosan történik. Ebben az esetben hatékonyan lehet különböző egydimenziós atomi modellpotenciálokat alkalmazni, amelyek kifejezetten jól használható eredményeket adnak, azonban gyakran szükség van ezen eredmények empirikus átskálázására [3].

A dolgozatom első felében azokat a folyamatokat tekintem át, amelyek lejátszódhatnak egy atomban kötött elektron ultrarövid lézerimpulzussal való kölcsönhatása során, valamint megemlítem az elméleti modelleket, amelyekkel egy ilyen probléma kezelhető és kísérletileg igazolt jóslatokat tesznek az egyes folyamatok kimeneteleire.

A dolgozat második részében az egyetlen aktív elektron közelítésben tekintett atomok egydimenziós modellezésére ismert modellpotenciálokat mutatom be. Ezen modellpotenciálok továbbfejlesztésével keresek olyan modellpotenciált, amely segítségével a kapott HHG-spektrum minél jobban közelíti a háromdimenziós numerikus eredményt a legfontosabb paraméterek minél szélesebb tartományában. Megvizsgálom, hogyan változik a HHG-spektrum két különböző paraméterezésű soft-Coulomb-potenciál Dirac-delta-potenciállal képzett lineáris kombinációi esetén. Az így szerzett tapasztalataim alapján, a két soft-Coulomb-potenciál kedvező tulajdonságainak segítségével új modellpotenciált definiálok, majd bemutatom, hogy ez a kísérletek szempontjából releváns paraméter-tartományban lényegesen pontosabb HHG-spektrumok ki-

számítását teszi lehetővé.

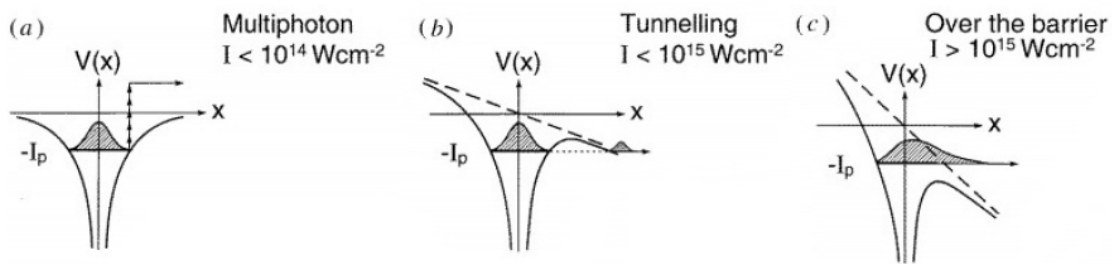
A dolgozatban az attoszekundumos fizikában megszokott atomi egységrendszert használom, azaz az elektron tömegét, az elemi töltést, a Coulomb-állandót és a redukált Planck-állandó értékét egységnyinek választjuk és minden más mennyiséget ezen mennyiségek alapján származtatunk ($m_e = 1$, $e = 1$, $k_e = 1$, $\hbar = 1$).

1. Femtoszekundumos lézerimpulzus és atomi elektron kölcsönhatása

Ebben a fejezetben áttekintjük az optikai alagúteffektussal történő ionizáció elméleti alapjait, valamint, hogy milyen folyamatok játszódhatnak le egy egyedülálló atom és egy folytonos lézertér vagy néhány ciklusos lézerimpulzus kölcsönhatása során. Ezután röviden ismertetjük a kölcsönhatás leírására gyakran használt elméleti modelleket.

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

Lineárisan polarizált ultrarövid impulzus és atom kölcsönhatásakor lehetséges folyamatok során fontos szerepet játszik az optikai alagúteffektussal történő ionizáció.



1. ábra. A három fő lehetséges ionizációs folyamat sematikus ábrája, Protopapas és szerzőtársai cikkje alapján [4]. Az (a) ábrán az intenzitás kisebb, mint 10^{14} W/cm^2 , ekkor a többfotonos ionizációs folyamat, angolul Multiphoton Ionization (MPI) 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 eltávozhathat az atomi potenciáltól. Ez az úgynevezett potenciálgát feletti ionizáció (c).

Femtosekundumos lézerimpulzus és atomi elektron kölcsönhatása során többféle ionizációs folyamat játszódhat le, ezeket az 1. ábra szemlélteti. Az optikai alagúteffektussal történő ionizáció elméleti alapjait L. V. Keldysh dolgozta ki [5]. Amennyiben a lézertér intenzitása elég nagy vagy a frekvenciája elég alacsony, akkor lehetséges, hogy az elektron alagúteffektussal átmegy a potenciálgáton, ami az atomi Coulomb-potenciál és a lézertér potenciáljának összegéből adódik (1. ábra (b)). Ha a lézertér frekvenciája alacsony, akkor az elektron által érzett poten-

ciált kvázi-stacionáriusnak lehet tekinteni, a nagy térerősség pedig ahhoz szükséges, 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 (1. ábra (c)). Miután az elektron optikai alagúteffektussal átjutott a potenciálgáton, jó közelítéssel klasszikus töltött részecskeként is kezelhető, ami a lézertér hatása alatt mozog. Ebben a modellben a lézertér fázisa az elektron ionizációjának időpillanatában meghatározza az elektron kezdeti sebességét és irányát [1]. Az optikai alagúteffektussal történő ionizáció valójában egy kvantummechanikai effektus, ezért célszerű ennek megfelelően kezelni. Az ionizációs folyamat nagyon gyorsan és minden optikai ciklusban az impulzus maximumai közelében zajlik le a legnagyobb valószínűséggel, ahol a lézertér leginkább torzítja az eredeti Coulomb-potenciált. Ha végső állapotnak egy Volkov állapotot választunk, a probléma jól leírható [6]. Mennyiségileg is jellemezhető, hogy melyik ionizációs folyamatnak nagyobb a valószínűsége a γ , úgynevezett Keldysh-paraméterrel:

$$\gamma^2 = \frac{2\omega^2 I_p}{I}, \quad (1.1)$$

ahol ω a lézerimpulzus frekvenciája, I_p az ionizációs potenciál és I a lézertér intenzitása. Amennyiben $\gamma > 1$, akkor a multifotonos ionizációs folyamat a leginkább jelentős, ekkor szemléletes a Keldysh-paraméterre úgy tekinteni, mint az atom ionizációs energiája és az elektron lézertérben történő rezgésének egy ciklusra átlagolt kinetikus energiájának négyzetgyök alatt vett aránya. Ha $\gamma < 1$, akkor az alagúteffektussal történő ionizációs folyamat a domináns. Amikor a Keldysh-paraméter jelentősen különbözik egytől, akkor az egyik ionizációs folyamat a domináns, amikor azonban közel van az egyhez, akkor a spektrum nagyon összetett, ezt a viselkedését kísérletileg is kimutatták az ionizációs spektrumból, [4].

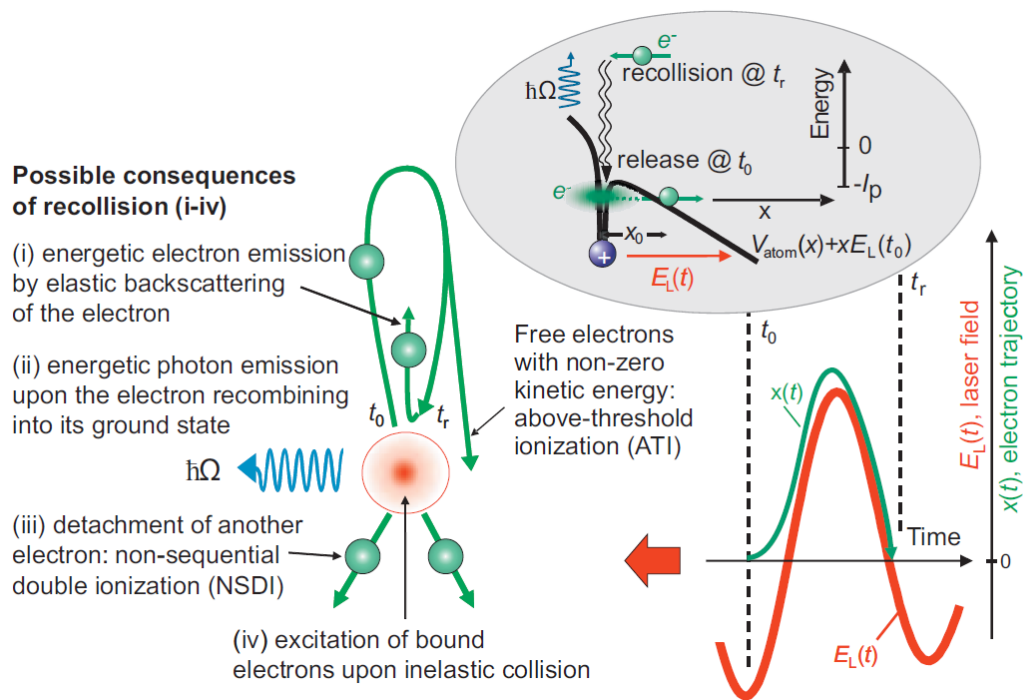
A többfotonos ionizációs folyamatok perturbációszámítással modellezhetők [7, 8], az n -fotonos ionizáció valószínűségét az alábbi képlet adja meg:

$$\Gamma_n = \sigma_n I^n, \quad (1.2)$$

ahol n az ionizációhoz szükséges minimális fotonszám, σ_n az általánosított hatáskeresztmetszet és I a bejövő lézertér intenzitása. A (1.2) képlet csak egy bizonyos kritikus intenzitásig érvényes, felette megváltozik az intenzitásfüggés [9]. Ezt az intenzitást szaturációs intenzitásnak nevezik. Annak ellenére, hogy az (1.2) kifejezés egyszerűnek tűnik, a σ_n elméleti meghatározása nehéz, különösen rezonancia esetén vagy ahhoz közel. Komplikációt okoz az is, ha a lézertér elektromos térerőssége olyan nagy, hogy összemérhető az iontörzshöz közeli Coulomb-térerősséggel. Ekkor ugyanis a perturbációszámítás már nem alkalmazható, és az atomi szintek

eltolódást szenvednek a lézertérrel történő erős csatolás miatt. Ez az úgynevezett AC-Stark eltolódás [10]. A többfotonos ionizáció az ionizált elektronok szempontjából egyik fontos alelete a küszöb feletti ionizáció, angolul Above Threshold Ionization (ATI), amikor néhány elnyelt fotonnal jelentősen nagyobb energiát vesz fel a kiszabaduló elektron, mint amekkora az ionizációs potenciál.

1.2. Lineárisan polarizált ultrarövid impulzus és atom kölcsönhatásakor lehetséges folyamatok



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

Több folyamat is lejátszódhat akkor, amikor egy lineárisan polarizált lézerimpulzus köl-

csönhat egy atommal, ezt szemlélteti a 2. ábra. Attól függően, hogy az elektron a lézertér vagy lézerimpulzus melyik fázisában ionizálódik, lehetséges, hogy az elektron a végtelenbe távozik, de az is megtörténhet, hogy a lézertér hatására a korábban ionizálódott elektron visszatér az iontörzshöz, és különböző folyamatokat idéz elő. Az egyik lehetőség, hogy az elektron rugalmasan szóródik az iontörzsen, és a detektor a visszaszóródott elektront detektálja (2. ábra (i)). Az is előfordulhat, hogy az elektron rekombinálódik az iontörzssel, és a lézertérből nyert kinetikus energiája, valamint az atomi ionizációs potenciál összegének megfelelő, $\hbar\Omega$ energiájú fotont emittál az atom (2. ábra (ii)):

$$\hbar\Omega = E_{kin} + I_p, \quad (1.3)$$

ahol E_{kin} az elektron kinetikus energiája a rekombinációt megelőzően, I_p pedig az atom ionizációs potenciálja. Ez a folyamat a magasharmonikus-keltés, amivel a későbbiekben részletesebben is foglalkozunk.

Kettős ionizációs folyamatok is lejátszódhatnak intenzív lézertérben, ezeket két kategóriába sorolhatjuk, a Sequential Double Ionization (SDI) és a Nonsequential Double Ionization (NSDI). Sequential Double Ionization esetén két elektron egymás után ionizálódik és köztük a kölcsönhatás elhanyagolható. Nonsequential Double Ionization esetén pedig a két elektron szinte egy időben ionizálódik és számottevő a kölcsönhatásuk (2. ábra (iii)). Ezeknek a folyamatoknak a részletes leírására nem térünk ki, mivel a kutatás során a hidrogénatomba kötött elektron és ultrarövid lézerimpulzus kölcsönhatását vizsgáltuk.

1.3. Lézertér és atom kölcsönhatásának leírásakor használt modellek

Az intenzív ultrarövid lézertér és anyag kölcsönhatásának leírásakor több különböző közelítő modell használatos.

Az egyetlen aktív elektron közelítés, angolul Single Active Electron Approximation (SAE) használata során feltesszük, hogy a lézertérrel csak az atom egyetlen, legkülső héjon fekvő elektronja tud kölcsönhatni. Ez a közelítés jól működik hidrogén-szerű ionok, alkálifémek és alkáli földfémek egyszeresen ionizált atomjai esetén, de szintén jó közelítést ad a valódi kísérletekben használt nemesgázatomok esetén is, valamint még abban az esetben is, ha kicsi az esélye annak, hogy a lézertér egyszerre több elektront is gerjesszen.

Optikai frekvenciájú lézertérrel való kölcsönhatás leírására gyakran alkalmazunk dipólközelítést, ekkor a lézerimpulzus elektromos mezőjének térbeli függését elhanyagoljuk és az atommag helyén felvett értékét használjuk (ezzel összhangban, a mágneses mező hatását teljesen

elhanyagoljuk). Ezt azért tehetjük meg, mert a fény-atom kölcsönhatások során a kísérletekben, így az elméleti modellekben is használt fény hullámhossza jelentősen meghaladja az atom vagy molekula méreteit.

Attól függően, hogy az elektront a klasszikus fizika vagy a kvantumfizika eszközeivel írjuk le, klasszikus vagy szemi-klasszikus közelítésről beszélhetünk. Klasszikus közelítés esetén az elektront töltéssel rendelkező klasszikus tömegpontnak tekintjük, aminek dinamikáját a Newton–Lorentz-egyenlet adja meg. A klasszikus közelítés előnye, hogy sok esetben analitikusan megoldható differenciálegyenlethez vezet, ha pedig analitikusan nem megoldható, a numerikus megoldás erőforrásigénye kisebb, mint a legtöbb közelítés esetén. Továbbá szemléletes képet ad az atomi folyamatokról. Hátránya, hogy nem tud számot adni a lézertér és atom kölcsönhatásakor lejátszódó kvantummechanikai effektusokról.

A szemi-klasszikus közelítésben az elektront a hozzárendelt hullámfüggvénnyel jellemezzük. Az elektron dinamikáját az időfüggő Schrödinger-egyenlet adja, aminek alakja három dimenzióban, koordinátareprezentációban:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = (H_0 + V_{\text{int}}(\mathbf{r},t))\Psi(\mathbf{r},t), \quad (1.4)$$

ahol H_0 az időfüggetlen Hamilton-operátor, V_{int} a lézerrel történő kölcsönhatást leíró, időfüggő része a Hamilton-operátornak. Az időfüggetlen Hamilton-operátor alakja koordinátareprezentációban:

$$H_0 = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_0(\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

ahol $V_0(\mathbf{r})$ az atomi Coulomb-potenciál. A szemi-klasszikus leírás előnye, hogy a segítségével le lehet írni a kvantummechanikai effektusokat, például az optikai alagúteffektust. A hátránya a klasszikus közelítéshez képest, hogy az (1.4) egyenlet analitikusan nem megoldható és a numerikus megoldásának sokkal nagyobb az erőforrásigénye.

Az erős tér közelítés, angolul Strong Field Approximation (SFA) az alapja a legtöbb analitikus megközelítésnek, amit például az ATI, HHG vagy NSDI folyamatok leírására használnak atomok és molekulák esetén egyaránt. A közelítés alapja, hogy az atom vagy molekula eredeti kötött állapotát nem befolyásolja a lézertér, de amint az elektron a kontinuumba kerül, csak a lézertér hatását vesszük figyelembe.

1.4. Magasrendű felharmonikusok keltése intenzív lézertérben

Lineárisan polarizált lézerimpulzus és atom kölcsönhatása során az atomban kötött elektron alagúteffektus révén is ionizálódhat, ezután pedig visszatérhet az ionhoz és rekombinálódhat, miközben az atom egy fotont bocsát ki, ez a magasrendű felharmonikus keltés. Ennek a folyamatnak a leírása egzaktul nem lehetséges, különböző analitikus közelítéseket vagy numerikus módszereket szokás használni. Az általunk használt közelítés a klasszikus elektrodinamikán alapul. Az elektron valószínűségi sűrűségét az elektrontöltéssel megszorozzuk, és klasszikus töltéssűrűségnek tekintjük, és a rekombinálódás során indukálódott időfüggő dipólmomentumot használjuk a kisugárzott spektrum számítására. A dipólmomentum várható értékét a ρ_z valószínűségi sűrűség segítségével az alábbi módon számoljuk:

$$\langle z \rangle(t) = \int_{-\infty}^{\infty} z \rho_z(z, t) dz. \quad (1.6)$$

Az időfüggő dipólmomentum második deriváltja

$$\langle a_z \rangle = \frac{\partial^2 \langle z \rangle}{\partial t^2} \quad (1.7)$$

a dipólgyorsulás és leggyakrabban ennek a Fourier-transzformáltjának a segítségével szokták becsülni a $p(f)$ HHG-spektrumot, azaz

$$p(f) = |\mathcal{F}(\langle a_z \rangle)(f)|^2, \quad (1.8)$$

ahol f a frekvencia. Erről a teljesítményspektrumról az olvasható le, hogy milyen valószínűséggel keletkezik egy adott frekvenciájú foton. Fontos megjegyezni, hogy a kísérletek során mérhető HHG-spektrum jelentősen eltérhet a fenti formulából kapottól, mert a makroszkopikus effektusok, amelyek sok elemi folyamat szuperpozíciójaként állnak elő, meghatározóak lehetnek a mérések során.

2. Intenzív lézertérrel kölcsönható atomi elektron kvantumdinamikája

Ha a bejövő lézertér intenzitása nagyobb, mint 10^{13} W/cm², az atomi elektron kvantumdinamikájának leírására a perturbációs számítás már nem alkalmas. Ez azt jelenti, hogy nagy intenzitások esetén nem-perturbatív módszerek szükségesek az atomi elektron időfüggő Schrödinger-egyenletének megoldásához, ez azonban már nem kezelhető analitikusan. Az egyik lehetőség a Schrödinger-egyenlet direkt numerikus integrálása, ami az intenzitás és frekvencia teljes tartományában alkalmazható. Ennek a módszernek azonban nagy az erőforrásigénye, ugyanis az erős lézertérben a hullámfüggvény nagy sebességgel terjed, így a numerikus integrálást nagyobb térrészre és kisebb lépésközzel kell elvégezni, ami jelentősen megnöveli a szimuláció futási idejét. A legegyszerűbb módja a számítási idő redukálásának a rendszer dimenziójának csökkentése. Ebben a fejezetben bemutatjuk azt a háromdimenziós rendszert, amit modellezni szeretnénk, utána pedig ismertetjük a közelítésre leggyakrabban használt egydimenziós modelleket. A fejezetben használt formulák hidrogénatom és egyetlen aktív elektron közelítésben vett atomok leírására alkalmasak.

2.1. A háromdimenziós rendszer

Az atomi elektron lineárisan polarizált lézerimpulzussal való kölcsönhatásának leírása során a probléma hengersizmetrikus marad, ezért célszerű hengerkoordináta-rendszert ($\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ és z) használni és a z -tengelyt a lézer polarizációjának irányába állítani. Egy háromdimenziós hidrogén vagy hidrogénszerű atom Hamilton-operátorát hengerkoordinátákban az alábbi módon adhatjuk meg:

$$H_0^{3D} = T_z + T_\rho - \frac{Z}{\sqrt{\rho^2 + z^2}}, \quad (2.1)$$

ahol Z az iontörzs töltése és

$$T_\rho = -\frac{1}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right), \quad T_z = -\frac{1}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.2)$$

a kinetikus energia operátorának megfelelő komponensei, μ az atom redukált tömege. A

$$H_0^{3D} \psi_{100}(z, \rho) = E_0 \psi_{100}(z, \rho) \quad (2.3)$$

egyenletet megoldva kapjuk az

$$E_0 = -\frac{\mu Z^2}{2} \quad (2.4)$$

alapállapot energiát és a

$$\psi_{100} = \mathcal{N} e^{-\mu Z \sqrt{\rho^2 + z^2}} \quad (2.5)$$

alapállapot hullámfüggvényét, ahol $\mathcal{N}$ egy valós normálási faktor. Egy lineárisan polarizált lézerimpulzus hatását tekintjük ezen a rendszeren és így a potenciál alakja dipólközelítésben és hosszsmértékben:

$$V_{\text{int}}(z, t) = z \mathcal{E}_z(t), \quad (2.6)$$

ahol $\mathcal{E}_z$ a lézertér elektromos térerőssége, amelynek konkrét alakja a szimulációk során

$$\mathcal{E}_z(t) = F \cdot \sin\left(\frac{\pi t}{N_C T}\right)^2 \cos\left(\frac{2\pi t}{T}\right), \quad (2.7)$$

ahol N_C az optikai ciklusok száma, F a térerősség amplitúdója, T az optikai ciklus periódus-ideje. Ebben az egyszerű lézerimpulzusmodellben eltekintünk a valódi lézerimpulzus egyéb paramétereitől, mint például a vivő-burkoló fáziskülönbség vagy a fázismoduláció. Az időfüggő Schrödinger-egyenletet szeretnénk megoldani:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{3D}(z, \rho, t) = (H_0^{3D} + V_{\text{int}}(z, t)) \Psi^{3D}(z, \rho, t), \quad (2.8)$$

a $t = 0$ -ban a $\psi_{100}(z, t)$ alapállapotból indulva. A rendszer numerikus szimulációjának eredményeit a kutatócsoport bocsátotta rendelkezésemre.

2.2. Az egydimenziós Schrödinger-egyenlet megoldása

Az egydimenziós közelítés esetén felerősödik a Coulomb-potenciál szingularitásának hatása, illetve az időfejlesztés során numerikus problémákat is okozhat, ezért általában valamilyen modellpotenciállal helyettesítik a Coulomb-potenciált. Az egydimenziósra redukált Schrödinger-egyenlettel végzett szimulációnak viszonylag rövid a futási ideje széles paramétertartományban, továbbá a számítási eredmények jó összhangban vannak azokkal a kísérleti eredményekkel, amikor a mozgás lényegében egy dimenzióban megy végbe, például lineárisan polarizált ultrarövid lézerimpulzussal való kölcsönhatás során.

Az előző alfejezetben tárgyalt háromdimenziós rendszer modellezésére az alábbi egydimenziós atomi Hamilton-operátort szokás felírni:

$$H_0^{1D} = T_z + V_0^{1D}(z), \quad (2.9)$$

ahol $V_0^{1D}(z)$ az atomi modellpotenciál. Az egydimenziós időfüggő Schrödinger-egyenlet koordináta-reprezentációban ekkor

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi^{1D}(z, t) = (H_0^{1D} + V_{\text{int}}(z, t)) \Psi^{1D}(z, t), \quad (2.10)$$

ahol V_{int} a (2.6) egyenletben megadott kölcsönhatási operátor. Fontos célkitűzésünk, hogy olyan egydimenziós modellpotenciált találjunk, amely segítségével a (2.7) térerősség átskálázására nincs szükség a háromdimenziós rendszer egydimenziós közelítése során, azaz az egydimenziós modellben ugyanazt a térerősséget használhatjuk, mint a háromdimenziós esetben.

A numerikus szimulációkhoz a Crank-Nicolson-módszert használjuk. Ehhez a (2.10) parciális differenciálegyenletet írjuk át differenciaegyenletté:

$$i \frac{\Psi_{j,k+1}^{1D} - \Psi_{j,k}^{1D}}{\Delta t} = -\frac{1}{2} \frac{\Psi_{j+1,k}^{1D} - 2\Psi_{j,k}^{1D} + \Psi_{j-1,k}^{1D}}{(\Delta z)^2} + V_{j,k} \Psi_{j,k}^{1D}, \quad (2.11)$$

ahol Δt az időbeli lépésköz, Δz a térbeli lépésköz, j a térbeli pontokat indexeli minden k -adik lépésben. Ebben az esetben $V_{j,k}$ jelöli az atomi potenciál és a lézertér potenciáljának összegét. A (2.11) egyenlet azonban nem unitér. Ennek a kiküszöbölésére integráljuk formálisan a (2.10) egyenletet, kis Δt -kre írhatjuk, hogy

$$\Psi^{1D}(z, t + \Delta t) = e^{-iH\Delta t} \Psi^{1D}(z, t), \quad (2.12)$$

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

$$\Psi_{j,k+1}^{1D} = (1 - iH\Delta t) \Psi_{j,k}^{1D}. \quad (2.13)$$

Azonban a (2.11) egyenletrendszert átalakíthatjuk az alábbi stabil rendszerré:

$$\Psi_{j,k+1}^{1D} = (1 + iH\Delta t)^{-1} \Psi_{j,k}^{1D}. \quad (2.14)$$

A (2.13) és (2.14) egyenletek Δt -ben elsőrendben pontosak, de egyik időfejlesztő operátor sem unitér. Viszont ha a Cayley-közelítést alkalmazzuk az $e^{-iH\Delta t}$ evolúciós operátor véges differencia módszerrel való közelítéséhez, akkor az alábbi időben másodrendben pontos és unitér időfejlesztő operátort kapjuk:

$$e^{-iH\Delta t} \simeq \left(\frac{1 - iH\frac{\Delta t}{2}}{1 + iH\frac{\Delta t}{2}} \right). \quad (2.15)$$

Ekkor a numerikus probléma megoldásához a

$$\Psi_{j,k+1}^{1D} = \left(\frac{1 - iH\frac{\Delta t}{2}}{1 + iH\frac{\Delta t}{2}} \right) \Psi_{j,k}^{1D} \quad (2.16)$$

lineáris egyenletrendszert kell megoldanunk minden egyes Δt lépésköze. A Crank-Nicolson-módszert használó szimulációban a Dirac-delta-potenciált az adott rácspontra kirótt peremfeltétellel lehet figyelembe venni. A kutatócsoport bocsátotta rendelkezésemre a szimulációt elvégző programot, és ezt használtam a dolgozatban bemutatott eredmények előállítására.

3. Magasrendű felharmonikus spektrum különböző modellpotenciálok esetén

Ebben a fejezetben áttekintek három egydimenziós atomi potenciált és megvizsgálom, hogy milyen HHG-spektrum kapható az alkalmazásukkal. Ezután a modellpotenciálok lineáris kombinációját is megvizsgálom és egy új modellpotenciált definiálok, ami a kísérletek szempontjából releváns paramétertartományban pontosabb HHG-spektrumok kiszámítását teszi lehetővé. A szimulációkat hidrogénatomra végeztem el.

3.1. Modellpotenciálok

Az egyik gyakran használt potenciál a Dirac-delta-potenciál, ami az alábbi alakú:

$$V_D(z) = -Z\delta(z), \quad (3.1)$$

ahol Z az iontörzs töltése. Az alapállapota analitikusan felírható:

$$\psi_{0,D}(z) = \sqrt{Z}e^{-Z|z|}, \quad (3.2)$$

az alapállapoti energiája pedig

$$E_{0,D} = -\frac{Z^2}{2}, \quad (3.3)$$

ami $Z = 1$ esetén a hidrogénatom alapállapoti energiája. A Dirac-delta-potenciál előnye, hogy analitikusan is kezelhető, valamint, hogy a lézertér nem torzítja az atomi potenciált, így az alagúteffektus mindig fellép. Ahogy a 3a. ábrán látható, a Dirac-delta-potenciállal kapott HHG-spektrum az alacsony frekvenciákra körülbelül 2 nagyságrenddel alulbecsüli, a magas frekvenciákra pedig körülbelül 2 nagyságrenddel túlbecsüli a teljesítményspektrumot.

A következő modellpotenciál az egydimenziós soft-Coulomb-potenciál, ami az erőstér fizikában leggyakrabban használt modellpotenciál. Az alakja:

$$V_{SC}(z) = -\frac{Z}{\sqrt{z^2 + \alpha^2}}, \quad (3.4)$$

ahol α egy simító paramétert, amit általában úgy választanak meg, hogy az alapállapoti energia a megfelelő értéket vegye fel. A hidrogénatom esetén, ha $\alpha = \sqrt{2}$, akkor az alapállapota

$$\psi_{0,SC}(z) = \mathcal{N}_{SC}(1 + \sqrt{z^2 + 2})e^{-\sqrt{z^2 + 2}}, \quad (3.5)$$

ahol $\mathcal{N}_{SC}$ normálási faktor. Az alapállapot energiája pedig

$$E_{0,SC} = -\frac{1}{2}. \quad (3.6)$$

Az egyik előnyös tulajdonsága, hogy nem tartalmazza a valódi Coulomb-potenciálban levő szingularitást, viszont magában foglalja a Coulomb-potenciál összes fő jellemvonását. Továbbá megkaphatóak belőle a hidrogénatom ionizációs küszöbhez közeli kötött állapotainak energiái, valamint a kontinuum állapotban reprodukálható belőle a Coulomb-torzítás. A soft-Coulomb-potenciállal kapott HHG-spektrum (3b. ábra) a magasabb frekvenciákra jól közelíti a valódi háromdimenziós eredményekkel kapott spektrumot, viszont az alacsony frekvenciák esetén túl nagy amplitúdókat ad, túlbecsüli a dipólmomentum értékét.

A harmadik modellpotenciál a módosított egydimenziós soft-Coulomb-potenciál a [3] cikk alapján. Ennek a modellpotenciálnak az esetén az alapállapot sűrűség jól közelíti a háromdimenziósról egydimenziósra redukált alapállapot sűrűségét. A modellpotenciál alakja az alábbi:

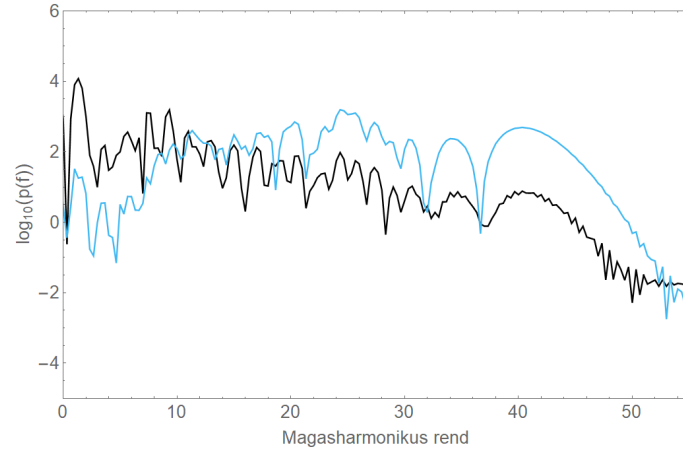
$$V_{MSC}(z) = -\frac{\frac{1}{2}Z}{\sqrt{z^2 + \frac{1}{4Z^2}}}. \quad (3.7)$$

Az alapállapotban a rendszer energiája:

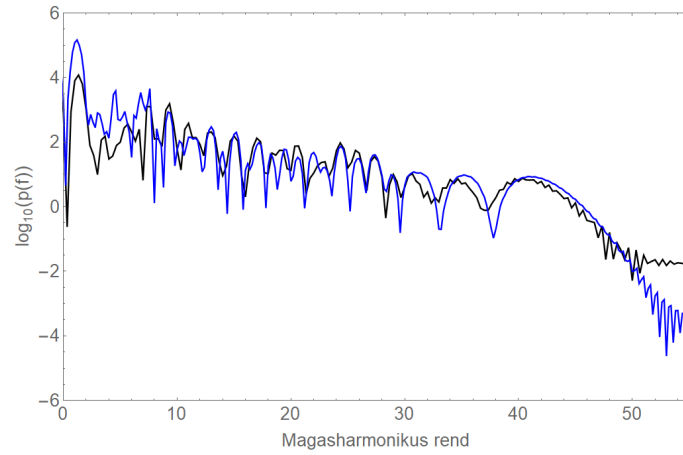
$$E_{0,MSC} = -\frac{\mu Z^2}{2}, \quad (3.8)$$

ami $Z = 1$ és $\mu = 1$ esetén megegyezik a hidrogén alapállapot energiájával. Ez a módosított soft-Coulomb-potenciál numerikusan jól kezelhető és nagyon jól modellezhető a segítségével a valódi háromdimenziós rendszer. A magasharmonikus-keltés spektruma esetén alacsony frekvenciákra jól illeszkedik a háromdimenziós szimulációval kapott eredményre, a magasabb frekvenciákra viszont körülbelül 2 nagyságrenddel nagyobb értékeket ad, így csak skálázás segítségével kapunk kellően pontos értékeket (3c. ábra).

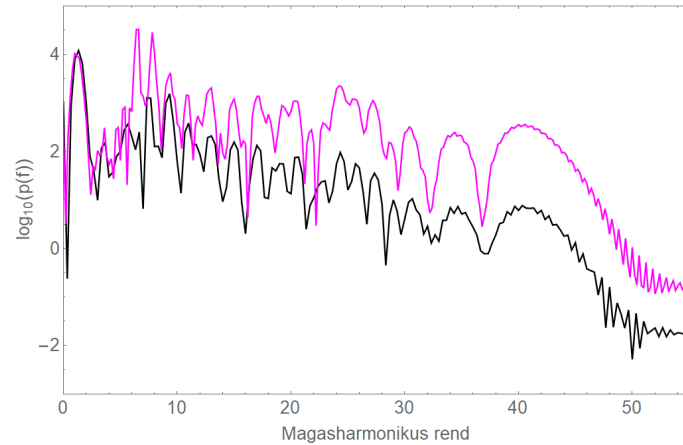
Mindegyik modellpotenciálnak vannak jó tulajdonságai, emiatt célszerű egy olyan modellpotenciált előállítani, ami a modellpotenciálok valamilyen súllyal vett összegeként áll elő. A kutatócsoport már foglalkozott ilyen lineáris kombinációkkal és találtak olyan modellpotenciált, ami a soft-Coulomb-potenciál és a Dirac-delta-potenciál súlyozott összegeként áll elő, alapállapot energiája megegyezik a hidrogénatom alapállapot energiájával és hasonló térerősség esetén hasonló nagyságú és lokalizáltságú áramsűrűséget produkál, mint a referenciának tekintett háromdimenziós szimuláció [11]. Azonban a HHG-spektrumot nem vizsgálták ezekkel a lineáris kombinációkkal.



(a) A háromdimenziós szimulációval (fekete) és a Dirac-delta-potenciállal (világoskék) kapott HHG-spektrum az (1.8) képlettel számolva, logaritmikus skálán.



(b) A háromdimenziós szimulációval (fekete) és a soft-Coulomb-potenciállal (kék) kapott HHG-spektrum az (1.8) képlettel számolva, logaritmikus skálán.



(c) A háromdimenziós szimulációval (fekete) és a módosított soft-Coulomb-potenciállal (lila) kapott HHG-spektrum az (1.8) képlettel számolva, logaritmikus skálán.

3. ábra. A paraméterek: $F = 0.1$, $N_C = 3$, $T = 100$. Az alapharmonikus $f_1 = 1/T = 0.01 \text{ a.u.}$

3.2. A módosított soft-Coulomb-potenciál és Dirac-delta-potenciál súlyozott összege

A magasrendű felharmonikus-spektrum pontosabb kiszámítása érdekében megvizsgáltam, hogy a módosított soft-Coulomb-potenciál és a Dirac-delta-potenciál súlyozott összegeként kapott modellpotenciál milyen eredményekre vezet. Ennek a modellpotenciálnak az általános alakja

$$V_{DMSC}(z) = c_1 \cdot V_D(z) + c_2 \cdot V_{MSC}(z), \quad (3.9)$$

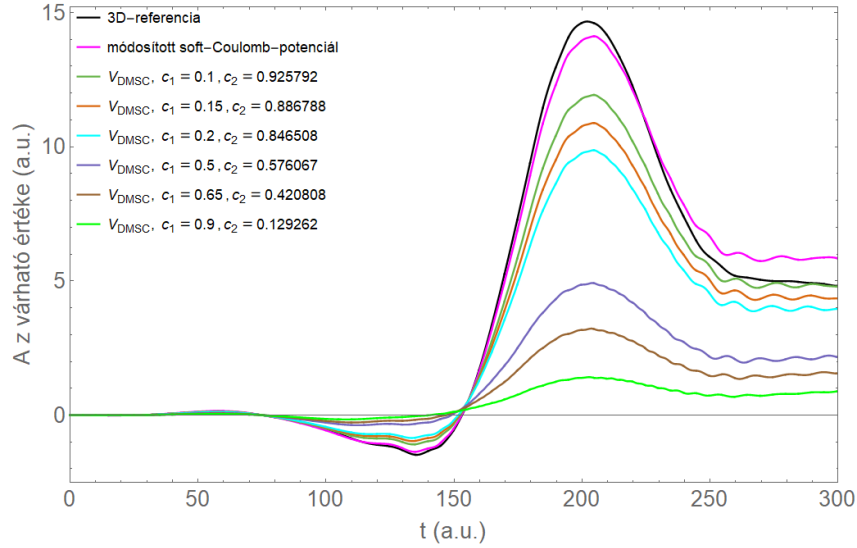
ahol c_1 és c_2 az egyes modellpotenciálok súlya. Ennek alapján olyan együtthatópárokat kerestem, amelyek esetén az alapállapot energiája értéke -0.5 , azaz megegyezik a modellezni kívánt hidrogénatom alapállapot energiájával. Ha a Dirac-delta potenciál súlya a nagyobb, akkor az túl erős kötést eredményez és így a dipólmomentum várható értéke lényegesen kisebb, mint a háromdimenziós eredmények esetén (4a. ábra). Ez alapján úgy gondoltam, hogy azok az együtthatópárok javíthatják a HHG-spektrumot, amelyek esetén a Dirac-delta-potenciál együtthatója a kisebb (4b. ábra). Az eredményekből az látható, hogy a Dirac-delta-potenciál hozzáadása az alacsony frekvenciákon csökkenti a teljesítményspektrumot, a magas frekvenciákon pedig növeli, tehát ezzel a megközelítéssel nem javítható a HHG-spektrum pontossága.

3.3. A soft-Coulomb-potenciál és Dirac-delta-potenciál súlyozott összege

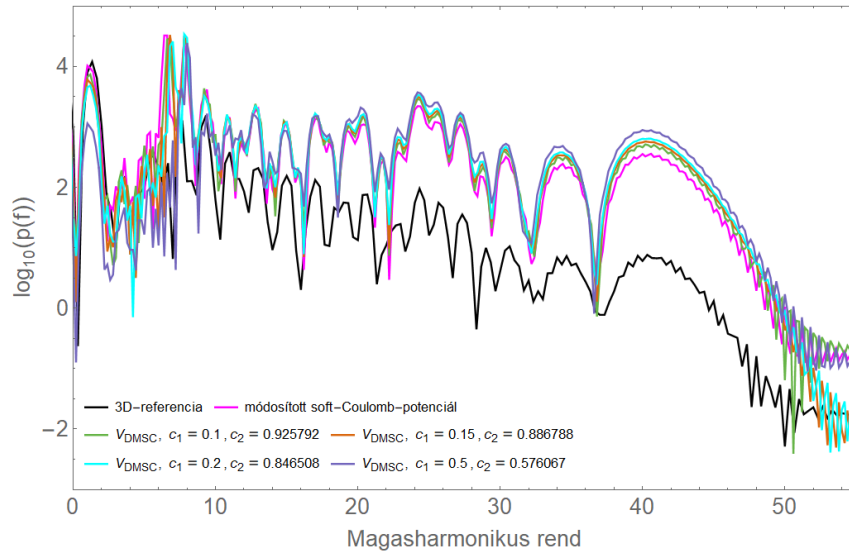
Ezután az eredeti soft-Coulomb-potenciál és Dirac-delta-potenciál súlyozott összegeként kapott modellpotenciál esetén vizsgáltam a HHG-spektrumot. Ennek a modellpotenciálnak az általános alakja

$$V_{DSC}(z) = c_1 \cdot V_D(z) + c_{2,s} \cdot V_{SC}(z), \quad (3.10)$$

ahol c_1 és $c_{2,s}$ az egyes modellpotenciálok súlya. Ismét olyan együtthatópárokat kerestem, amelyekre az alapállapot energiája értéke -0.5 . Ha a Dirac-delta-potenciál súlya és a soft-Coulomb-potenciál súlya nagyjából megegyezik, akkor a dipólmomentum várható értéke jól közelíti a háromdimenziós szimulációval kapott várható értéket (5a. ábra). A HHG-spektrum esetében viszont az látható, hogy ha a soft-Coulomb-potenciálhoz nem adunk Dirac-delta-potenciált, akkor a magasabb frekvenciák esetén nagyon jól illeszkedik a háromdimenziós szimuláció eredményére. Továbbá, a Dirac-delta-potenciál hozzáadása az alacsony frekvenciás részt nem javítja olyan mértékben, hogy azzal kellően pontos értékeket kapnánk, a magasabb frekvenciákra pedig elrontja a korábbi jobb illeszkedést.

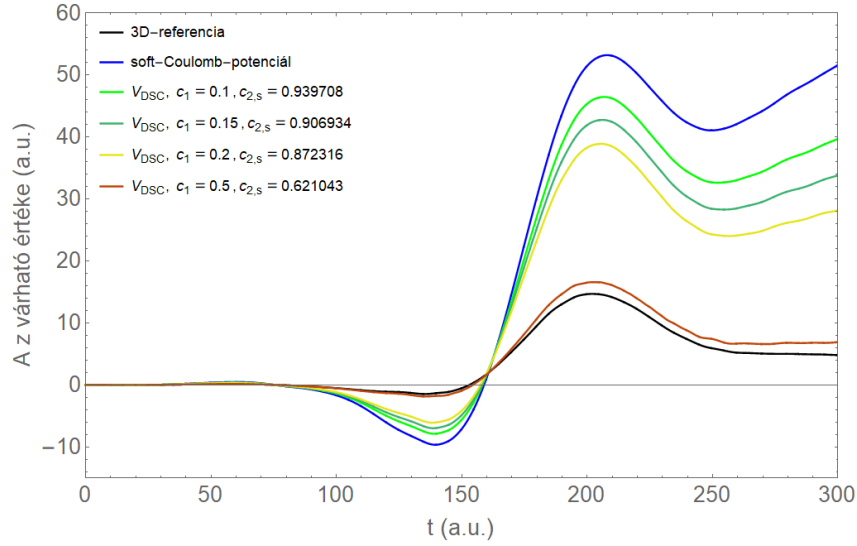


(a) A z várható értéke a háromdimenziós szimuláció esetén (fekete) és a $V_{DMSC}(z)$ potenciállal különböző együtthatópárookra.

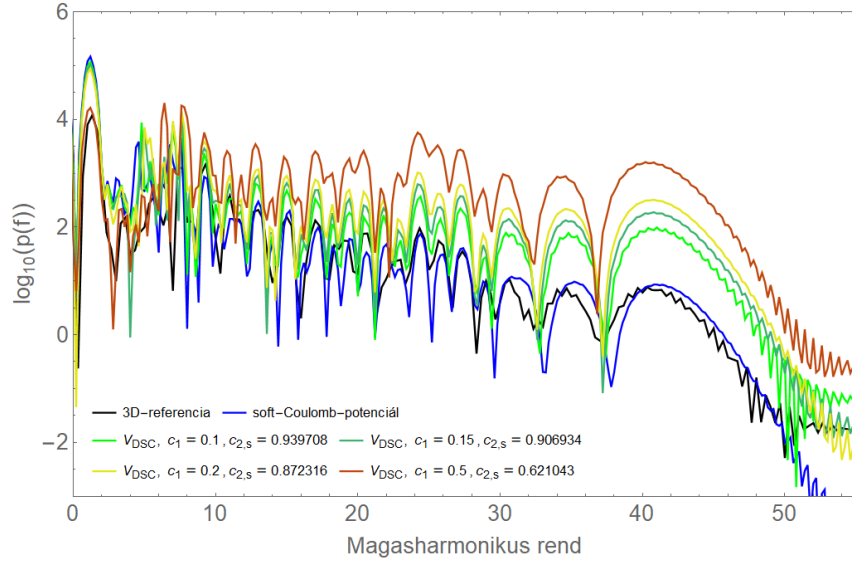


(b) A háromdimenziós szimulációval (fekete) és a $V_{DMSC}(z)$ potenciállal különböző együtthatópárookra kapott HHG-spektrum az (1.8) képlettel számolva, logaritmikus skálán.

4. ábra. A paraméterek: $F = 0.1$, $N_C = 3$, $T = 100$.



(a) A z várható értéke a háromdimenziós szimuláció esetén (fekete) és a $V_{DSC}(z)$ potenciállal különböző együtthatópárookra.



(b) A háromdimenziós szimulációval (fekete) és a $V_{DSC}(z)$ potenciállal különböző együtthatópárookra kapott HHG-spektrum az (1.8) képlettel számolva, logaritmus skálán.

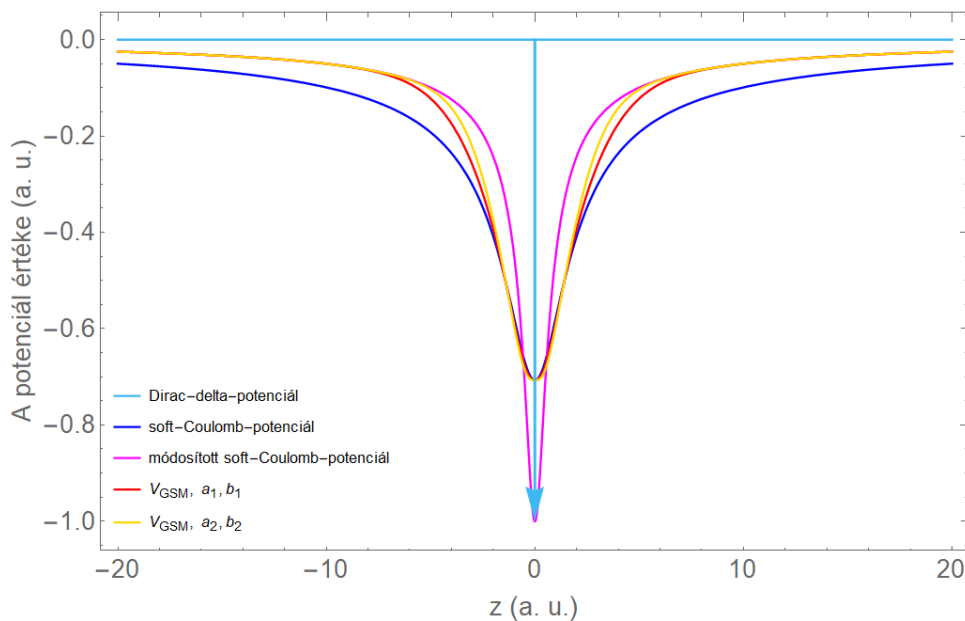
5. ábra. A paraméterek: $F = 0.1$, $N_C = 3$, $T = 100$.

3.4. A soft-Coulomb-potenciál és a módosított soft-Coulomb potenciál kombinálása

Az előző két alfejezetben tárgyalt tapasztalatok alapján azt a következtetést vontam le, hogy a HHG-spektrum magas frekvenciás része akkor közelíti a legjobban a háromdimenziós referenciát, ha a centrumban kevésbé erősen köt a potenciál, az alacsony frekvenciákra pedig akkor kapunk jobb értékeket, ha a centrumtól távolabb gyorsabban tart a 0-hoz a potenciál. Így egy olyan modellpotenciált kerestem, ami a centrum körül a soft-Coulomb-potenciálhoz hasonlít jobban, utána gyorsabban tart a 0-hoz, a módosított soft-Coulomb-potenciálhoz hasonlóan. Ehhez Gauss-ablak segítségével kombináltam a két potenciált az alábbi módon:

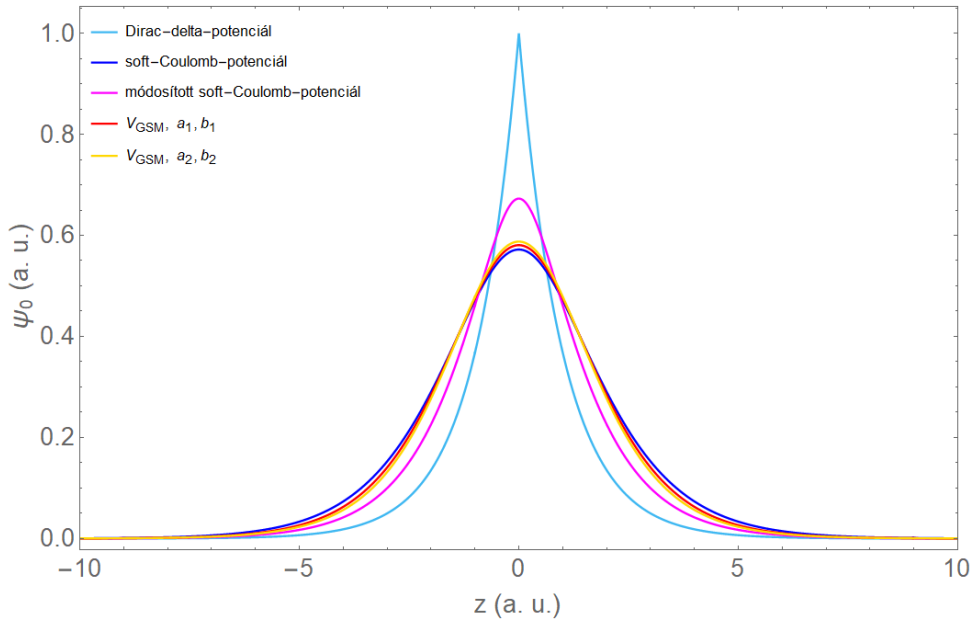
$$V_{GSM}(z) = V_{SC}(z) \cdot e^{-(z/a)^2} + V_{MSC}(z) \left(1 - e^{-2 \cdot (z/b)^2}\right), \quad (3.11)$$

ahol az a és b numerikus értékek segítségével biztosítani lehet, hogy az alapállapot energiája -0.5 legyen. Két paraméterpárt vizsgáltam, ami teljesíti az előző kritériumot, az $a_1 = 3.57414$ és $b_1 = 4.01$, valamint az $a_2 = 2.551$ és $b_2 = 2\sqrt{2}$. Ezen paraméterek esetén a potenciál alakja a 6. ábrán látható.



6. ábra. A modellpotenciálok: soft-Coulomb-potenciál (kék), módosított soft-Coulomb-potenciál (lila), Dirac-delta-potenciál (világoskék) és a Gauss-ablakkal kapott potenciálok (piros és sárga), $Z = 1$ esetén.

A V_{GSM} potenciállal és a (2.7) alakú lézerimpulzussal különböző F térerősség amplitúdók esetén elvégeztem a szimulációt, ezeknek az eredményei a 8a-11c. ábrákon láthatóak. A négy



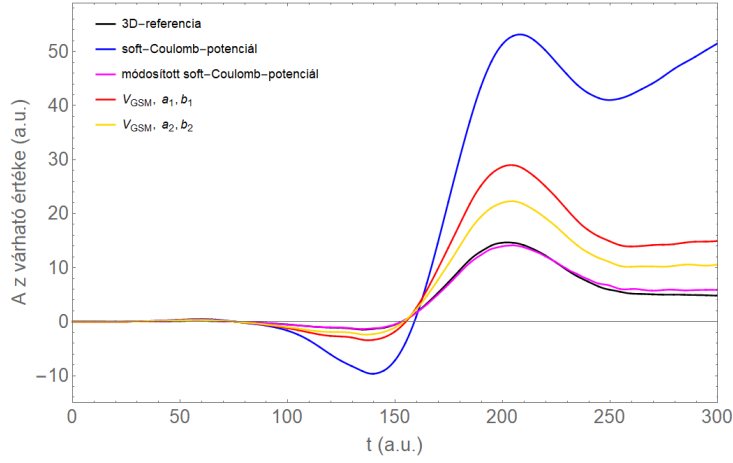
7. ábra. A különböző modellpotenciálokkal kapott alapállapot $Z = 1$ esetén.

térerősség amplitúdó közül az $F = 0.1$ és $F = 0.08$ esetén potenciálgát feletti ionizáció révén is kiszabadulhat az elektron az atomból, $F = 0.06$ és $F = 0.05$ esetén pedig az alagúteffektussal történő ionizációnak a legnagyobb a valószínűsége, de ebben az esetben a potenciálgát feletti lehetséges útvonalak is befolyásolják az ionizációs folyamatot [12]. Az eredmények vizsgálata során az látható, hogy a kombinált potenciálok a dipólmomentum várható értékére jobb közelítést adnak, mint a soft-Coulomb-potenciál, de a háromdimenziós eredményhez képest túlbecsülik a dipólmomentum várható értékét (8a,9a,10a,11a ábrák). A dipólmomentum várható értéke nagyon érzékeny a térerősség megváltoztatására, a térerősség felére csökkentésével közel két nagyságrenddel csökken. Egyre kisebb térerősségek esetén a lézerimpulzus alakja is egyre jobban felfedezhető a dipólmomentum várható értékének időfüggésében. Ennek oka, hogy alacsony térerősség esetén - főként a lézerimpulzussal történő kölcsönhatás első felében - a hullámfüggvény alig "jön ki" a kötött állapotból, ezért $F = 0.05$ -nél kisebb térerősség esetén nincs értelme HHG-spektrumot vizsgálni.

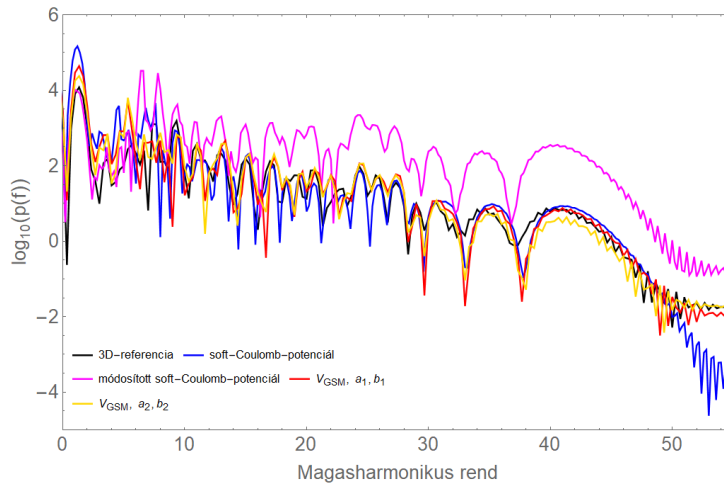
A HHG-spektrum esetén az alacsony frekvenciákon a módosított soft-Coulomb-potenciállal kapjuk a legpontosabb eredményeket mindegyik vizsgált térerősség amplitúdó esetén, azonban ez a magasabb frekvenciákra $F = 0.1$ és $F = 0.08$ esetén körülbelül 2 nagyságrenddel (8b., 9b. ábrák), $F = 0.06$ és $F = 0.05$ esetén pedig 1 nagyságrenddel (10b., 11b. ábrák) túlbecsüli a teljesítményspektrumot. A soft-Coulomb-potenciállal kapott spektrum $F = 0.1$ esetén a magas frekvenciákkal jó egyezést mutat, a többi vizsgált térerősség esetén viszont körülbelül 1 nagy-

ságrenddel túlbecsüli a teljesítményspektrumot szinte a teljes vizsgált frekvenciatartományra. A V_{GSM} potenciálok az $F = 0.1$ térerősség amplitúdó esetén a HHG-spektrumra (8b. ábra) a vizsgált frekvenciatartomány egészére jó közelítést adnak. A magasabb frekvenciák esetén az a_1, b_1 paraméterpár jó egyezést mutat a háromdimenziós eredménnyel, az alacsonyabb frekvenciákra viszont az a_2, b_2 paraméterpár ad jobb közelítést. Az alacsony frekvenciákra az a_1, b_1 paraméterpárral körülbelül a háromdimenziós eredmény négyszeresét kapjuk, az a_2, b_2 paraméterpárral körülbelül a kétszeresét. A térerősség csökkentésével a vizsgált frekvenciatartomány nagy részére a két különböző paraméterezésű V_{GSM} potenciál a háromdimenziós szimulációhoz képest nagyobb értékeket ad, az a_1, b_1 paraméterpárral szinte minden frekvenciára a háromdimenziós eredmény négyszeresét kapjuk, az a_2, b_2 paraméterpárral körülbelül a kétszeresét. Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy a V_{GSM} potenciálokkal kapott teljesítményspektrumok sokkal pontosabban közelítik a háromdimenziós eredményeket, mint a többi vizsgált modellpotenciál.

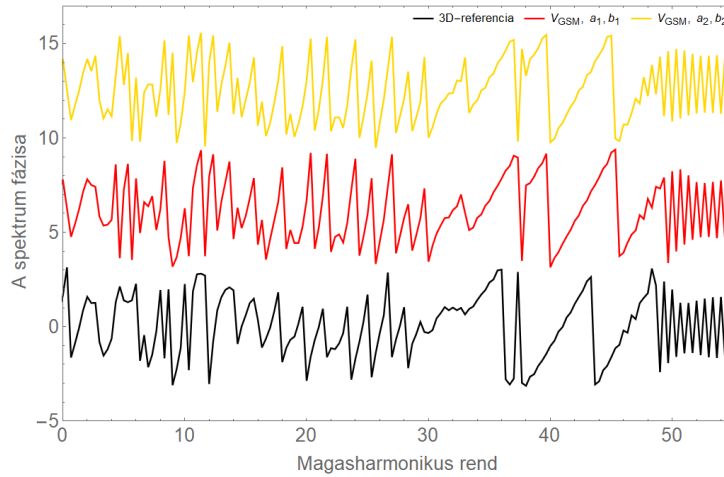
Az attoszekundumos impulzusok generálása szempontjából a HHG-spektrum fázisának minél jobb illeszkedése is nagyon fontos, hiszen a sugárzás elektromos mezője egy adott frekvencián megörökli az ugyanazon frekvenciájú dipólmomentum fázisát és így döntően befolyásolja a HHG-sugárzásból szintetizálható attoszekundumos impulzusok alakját. A V_{GSM} potenciálok esetén a dipólgyorsulás spektrum fázisának fő karakterisztikája jól követi a háromdimenziós szimulációval kapott eredményt. A magasabb frekvenciás tartományban az $F = 0.1$ térerősség esetén a 35-50. felharmonikus körül (8c. ábra), az $F = 0.08$ térerősség esetén a 28-35. felharmonikus körül (9c. ábra), az $F = 0.06$ térerősség esetén a 20-28. felharmonikus körül (10c. ábra) a V_{GSM} potenciálokkal kapott értékeknél a görbe meredeksége nagyon jól közelíti a háromdimenziós szimulációval kapott görbét, ez pedig kifejezetten fontos, mivel ez az a tartomány, amit izolált attoszekundumos impulzus, angolul Isolated Attosecond Pulse (IAP), generálására alkalmaznak. Megfigyelhető, hogy a legnagyobb térerősség esetén kapjuk a legjobb egyezést. A térerősség csökkentésével ugyan romlik a pontosság, de mindvégig a V_{GSM} potenciálokkal kapjuk a legjobb közelítést.



(a) A dipólmomentum várható értéke.

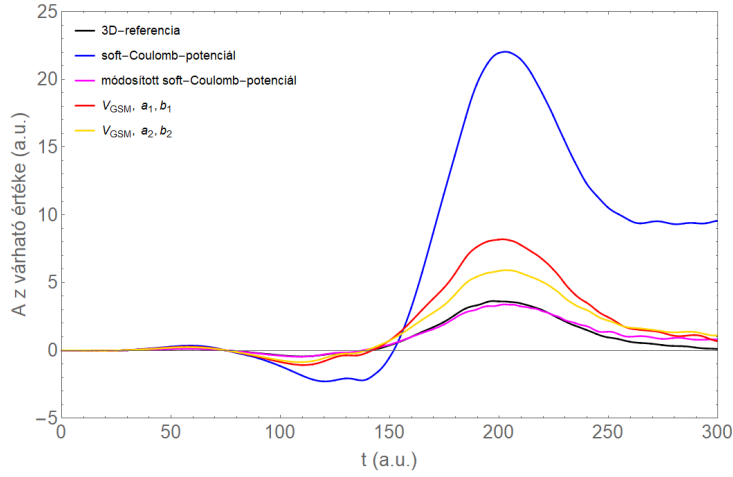


(b) A HHG-spektrum az (1.8) képlettel számolva, logaritmus skálán.

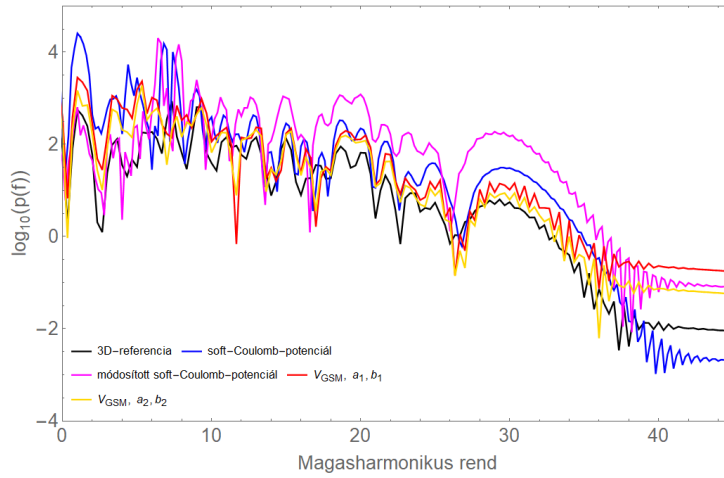


(c) A dipólgyorsulás spektrumának fázisa (a piros görbe 2π -vel, a sárga görbe 4π -vel eltolva a jobb áttekinthetőség érdekében).

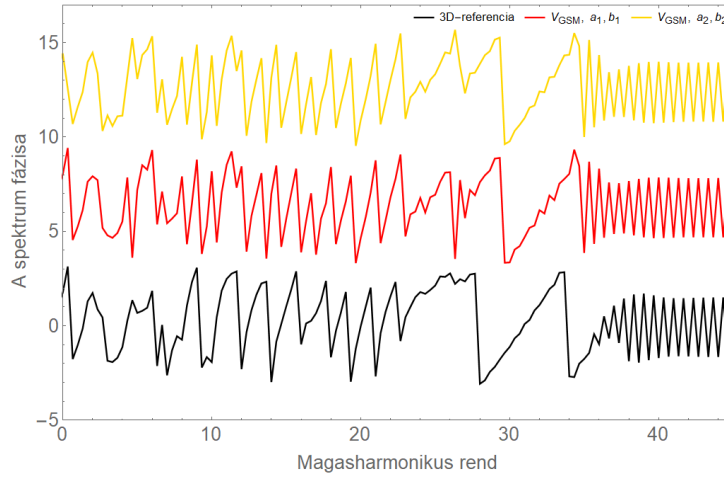
8. ábra. A háromdimenziós szimulációval (fekete), a soft-Coulomb-potenciállal (kék), a módosított soft-Coulomb-potenciállal (lila) és a V_{GSM} potenciál kétféle paraméterezésével kapott eredmények. A paraméterek: $F = 0.1$, $N_C = 3$, $T = 100$.



(a) A dipólmomentum várható értéke.

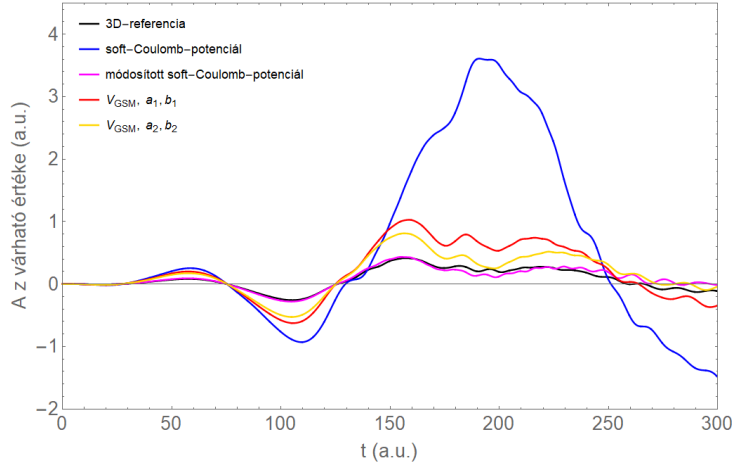


(b) A HHG-spektrum az (1.8) képlettel számolva, logaritmikus skálán.

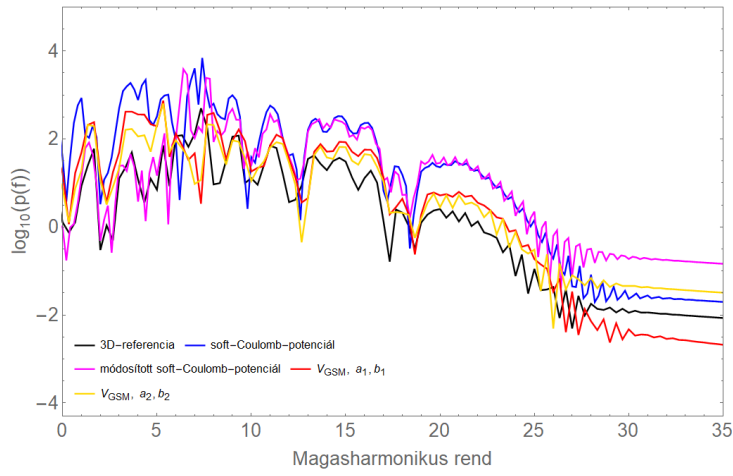


(c) A dipólgyorsulás spektrumának fázisa (a piros görbe 2π -vel, a sárga görbe 4π -vel eltolva a jobb áttekinthetőség érdekében).

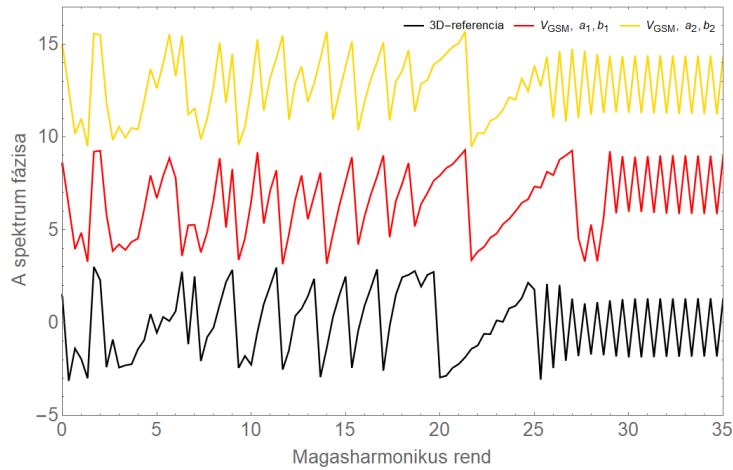
9. ábra. A háromdimenziós szimulációval (fekete), a soft-Coulomb-potenciállal (kék), a módosított soft-Coulomb-potenciállal (lila) és a V_{GSM} potenciál kétféle paraméterezésével kapott eredmények. A paraméterek: $F = 0.08$, $N_C = 3$, $T = 100$.



(a) A dipólmomentum várható értéke.

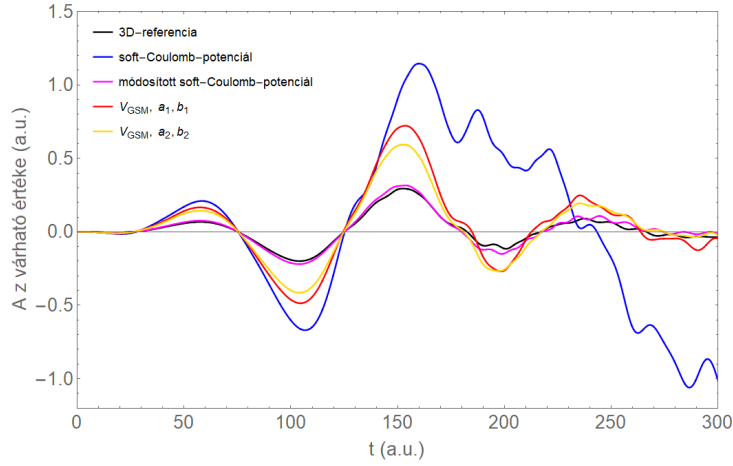


(b) A HHG-spektrum az (1.8) képlettel számolva, logaritmus skálán.

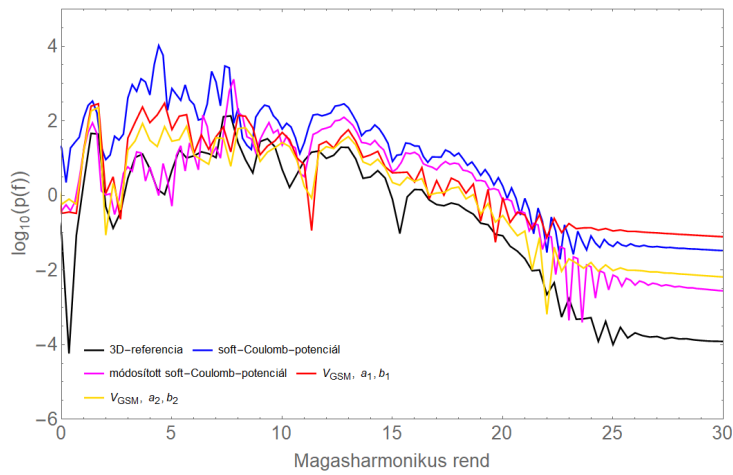


(c) A dipólgyorsulás spektrumának fázisa (a piros görbe 2π -vel, a sárga görbe 4π -vel eltolva a jobb áttekinthetőség érdekében).

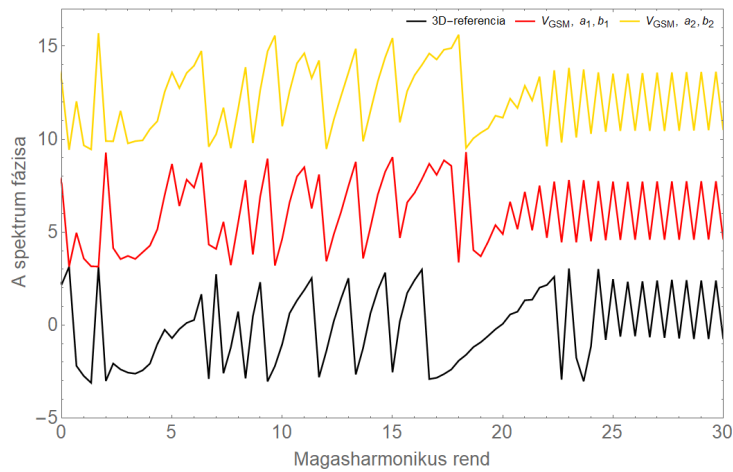
10. ábra. A háromdimenziós szimulációval (fekete), a soft-Coulomb-potenciállal (kék), a módosított soft-Coulomb-potenciállal (lila) és a V_{GSM} potenciál kétféle paraméterezésével kapott eredmények. A paraméterek: $F = 0.06$, $N_C = 3$, $T = 100$.



(a) A dipólmomentum várható értéke.



(b) A HHG-spektrum az (1.8) képlettel számolva, logaritmus skálán.



(c) A dipólgyorsulás spektrumának fázisa (a piros görbe 2π -vel, a sárga görbe 4π -vel eltolva a jobb áttekinthetőség érdekében).

11. ábra. A háromdimenziós szimulációval (fekete), a soft-Coulomb-potenciállal (kék), a módosított soft-Coulomb-potenciállal (lila) és a V_{GSM} potenciál kétféle paraméterezésével kapott eredmények. A paraméterek: $F = 0.05$, $N_C = 3$, $T = 100$.

4. Összefoglalás és kitekintés

A dolgozatban áttekintettük egy atomban kötött elektron ultrarövid lézerimpulzussal való kölcsönhatása során lehetségesen végbemenő folyamatokat, valamint ismertettük a szakirodalomban megjelent elméleti modelleket és eredményeket. Ezután egyetlen aktív elektron közelítésben tekintett atomok egydimenziós modellezésére ismert modellpotenciálokat mutattunk be és megvizsgáltuk, hogy milyen HHG-spektrumot kapunk az alkalmazásukkal. Ezt követően egy olyan modellpotenciált kerestünk, amivel a legfontosabb paraméterek minél szélesebb tartományában a valódi háromdimenziós esettel összehasonlítva minél pontosabb HHG-spektrumot kaphatunk. Megvizsgáltuk a Dirac-delta-potenciál és a módosított soft-Coulomb-potenciál, illetve a soft-Coulomb-potenciál súlyozott összegeként előálló modellpotenciálokat. Mind a két esetben azt tapasztaltuk, hogy a Dirac-delta-potenciál hozzáadása a teljesítményspektrumot magas frekvenciákon növeli, alacsony frekvenciákon csökkenti. Továbbá megfigyeltük, hogy az egydimenziós modellpotenciálokkal kapott HHG-spektrum akkor mutat jó egyezést a háromdimenziós szimuláció eredményével, ha a potenciál a centrumban kevésbé köt erősen, a centrumtól távolodva pedig gyorsabban tart a 0-hoz. Ennek felhasználásával a soft-Coulomb-potenciált és a módosított soft-Coulomb-potenciált kombináltuk Gauss-ablak segítségével (3.11) és azt tapasztaltuk, hogy ez a kombinált potenciál sokkal pontosabb HHG-spektrumok kiszámítását teszi lehetővé (8b. ábra). További térerősség amplitúdók esetén is elvégezve a szimulációt, a vizsgált frekvenciatartomány nagy részére a két különböző paraméterezésű V_{GSM} potenciál a háromdimenziós szimulációhoz képest valamivel nagyobb értékeket ad, de a többi vizsgált modellpotenciálhoz képest lényegesen jobban közelítik a háromdimenziós eredményeket (9b,10b,11b ábrák).

Az attoszekundumos impulzusok generálása szempontjából a HHG-spektrum fázisának minél jobb illeszkedése is kifejezetten fontos, mert döntően befolyásolja a HHG-sugárzásból szintetizálható attoszekundumos impulzusok alakját. A V_{GSM} potenciálok esetén a dipólgyorsulás spektrum fázisának fő karakterisztikája jól követi a háromdimenziós szimulációval kapott eredményt (8c,9c,10c,11c ábrák). A magasabb frekvenciás tartományban a két különböző paraméterezésű V_{GSM} potenciállal kapott értékeknél a görbe meredeksége nagyon jól közelíti a háromdimenziós szimulációval kapott görbét, ez pedig kifejezetten fontos, mivel ez az a tartomány, amit izolált attoszekundumos impulzus generálására alkalmaznak.

A V_{GSM} potenciál vizsgálata során az $F = 0.1$ térerősség amplitúdó esetén az látható, hogy az alacsony frekvenciákon túlbecsüli a teljesítményspektrumot, a magas frekvenciákon pedig

alulbecsüli. A két különböző paraméterezésű soft-Coulomb-potenciálhoz hozzáadott Dirac-delta-potenciál hatása pont ennek az ellenkezője, ezért ígéretes lehetőségnek tartjuk a V_{GSM} potenciál Dirac-delta-potenciállal képzett lineáris kombinációjának vizsgálatát. Az alacsonyabb térerősség amplitúdók esetén viszont mindkét általunk vizsgált paraméterpárra a kombinált potenciál szinte minden frekvenciára túlbecsüli a háromdimenziós eredményt, ezért lehetséges, hogy a V_{GSM} potenciál új paraméterezésére lesz szükség vagy a soft-Coulomb-potenciálok más típusú kombinációja vezethet pontosabb HHG-spektrum számításához.

Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretném megköszönni Dr. Czirják Attilának és Dr. Hack Szabolcsnak, hogy szakmai tudásukkal és útmutatásukkal segítették a munkámat. Köszönöm Dr. Majorosi Szilárdnak a mindig megbízhatóan működő szimulációt. Szeretnék köszönetet mondani Dr. Fehér László tanszékvezető egyetemi tanárnak és a tanszék összes dolgozójának a lehetőségért, hogy a dolgozatomat a Szegedi Tudományegyetem Elméleti Fizikai Tanszékén készíthettem el.

Hivatkozások

- [1] P. B. Corkum. Plasma perspective on strong multiphoton ionization. *Physical Review Letters*, 71:1994, 1993.
- [2] F. Krausz and M. Ivanov. Attosecond physics. *Reviews of Modern Physics*, 81, 2009.
- [3] Sz. Majorosi, M. G. Benedict, and A. Czirják. Improved one-dimensional model potentials for strong-field simulations. *Physical Review A*, 98,023041, 2018.
- [4] M. Protopapas, C. H. Keitel, and P. L. Knight. Atomic physics with super-high intensity lasers. *Reports on Progress in Physics*, 60:389, 1997.
- [5] L. V. Keldysh. Ionization in the field of a strong electromagnetic wave. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 20:1307, 1965.
- [6] S. Varró. Bevezetés az intenzív fény és anyag kölcsönhatásának elméleti leírásába. *Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Fizikai Tanszék*, 2010.
- [7] F. Fabre, G. Petite, P. Agostini, and M. Clement. Multiphoton above-threshold ionisation of xenon at 0.53 and 1.06 μm . *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics*, 15(9):1353, 1982.
- [8] G. Petite, F. Fabre, P. Agostini, M. Crance, and M. Aymar. Nonresonant multiphoton ionization of cesium in strong fields: Angular distributions and above-threshold ionization. *Physical Review A*, 29:2677, 1984.
- [9] L.-A. Lompré, A. L’Huillier, G. Mainfray, and C. Manus. Multiphoton ionisation of He atoms at 532 nm. *Physics Letters A*, 112(6):319, 1985.
- [10] R. R. Freeman, P. H. Bucksbaum, H. Milchberg, S. Darack, D. Schumacher, and M. E. Geusic. Above-threshold ionization with subpicosecond laser pulses. *Physical Review Letters*, 59:1092, 1987.
- [11] Sz. Hack. Optikai alagutazás klasszikus és kvantum dinamikája a fázistéren. *Tudományos Diákköri Dolgozat*, 2015.
- [12] Sz. Hack, Sz. Majorosi, M. G. Benedict, S. Varró, and A. Czirják. Quantum interference in strong-field ionization by a linearly polarized laser pulse and its relevance to tunnel exit time and momentum. *Physical Review A*, 104:L031102, 2021.