

UNIVERSITATEA "BABEȘ-BOLYAI" CLUJ-NAPOCA
FACULTATEA DE FIZICĂ
SPECIALIZAREA FIZICĂ TEHNOLOGICĂ

LUCRARE DE LICENȚĂ

Coordonator științific
Dr. Borbély Sándor

Absolvent
Joós Krisztina

2024

UNIVERSITATEA "BABEȘ-BOLYAI" CLUJ-NAPOCA
FACULTATEA DE FIZICĂ
SPECIALIZAREA FIZICĂ TEHNOLOGICĂ

LUCRARE DE LICENȚĂ

INTERACȚIE LASER-MATERIE: INTERFERENȚA PACHETELOR DE UNDE
ELECTRONICE

Coordonator științific
Dr. Borbély Sándor

Absolvent
Joós Krisztina

2024

BABEŞ-BOLYAI TUDOMÁNYEGYETEM, KOLOZSVÁR
FIZIKA KAR
MÉRNÖKI FIZIKA SZAK

LICENSZ DOLGOZAT

LÉZER-ANYAG KÖLCSÖNHATÁS: ELEKTRONHULLÁMC SOMAG-INTERFERENCIA

Témavezető tanár
Dr. Borbély Sándor

Hallgató
Joós Krisztina

2024

Kivonat

Jelen dolgozat az egy-elektron közelítésre épülő, a lézer-atom kölcsönhatást erős tér közelítésben (strong-field approximation) tárgyaló modell elméleti háttérének és számítógépes implementációjának bemutatásával indít. Modellünk egy elsőrendű közelítés, amely lehetőséget ad a lézer által indukált direkt ionizációs eseményekhez tartozó valószínűségi amplitúdók kiszámítására, adott térparaméterek mellett és meghatározott végállapotokra.

A továbbiakban a modell pontossága kerül tanulmányozásra, a Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásával való összehasonlítás során, amely alapján be lehet azonosítani a lézerparaméter-tér azon tartományát, amelyben az erős tér közelítés elfogadható eredményeket szolgáltat. Végül pedig a lézer-atom kölcsönhatás során keletkező elektronhullámcsomagok interferenciáját vizsgáljuk, a keletkezett interferenciaminták és a célatom szerkezete közötti összefüggések felfedezése érdekében.

Abstract

Our thesis begins by presenting the theoretical background and the computer implementation of a model for laser-atom interaction in the strong-field approximation based on the single-active-electron model. Our model is a first-order approximation that allows the calculation of probability amplitudes associated with laser-induced direct ionization events for given field parameters and defined final states.

In the following, the accuracy of the model will be studied by comparison with the exact numerical solution of the Schrödinger equation, which can be used to identify the range of laser parameter space in which the strong field approximation yields acceptable results. Finally, the interference of electron wave packets generated during laser-atom interactions is investigated in order to explore the relationship between the interference patterns generated and the structure of the target atom.

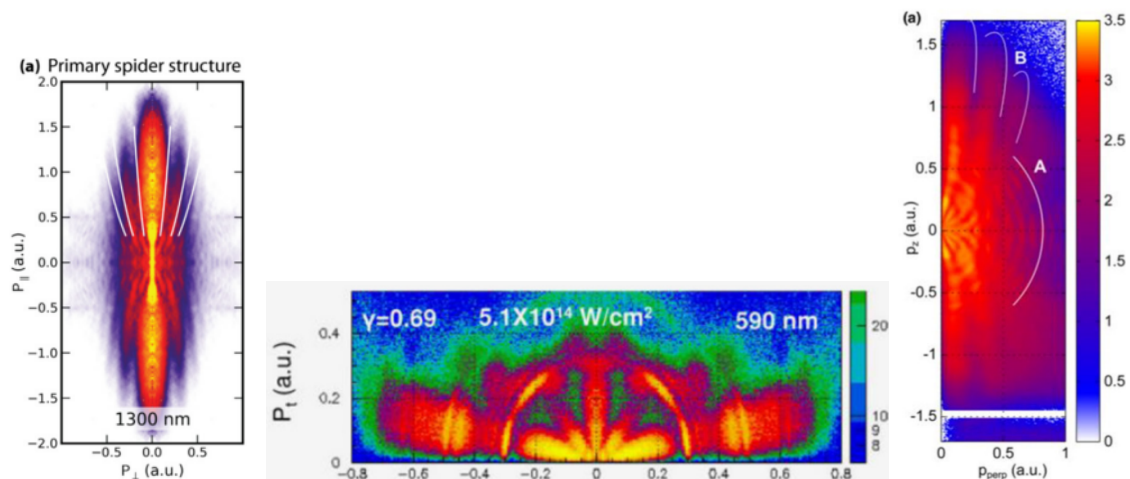
Tartalomjegyzék

Bevezető	5
1. Elméleti háttér	7
1.1. Sokfoton jelenségek	7
1.2. Elektron klasszikus nemrelativisztikus dinamikája lézertérben	7
1.3. Dipól közelítés	9
1.4. Az evolúciós operátor	10
1.5. Gordon-Volkov hullámfüggvények	11
2. Erős tér közelítés	12
3. Elsőrendű SFA modell hidrogén atomra	15
3.1. Analitikus számítások	15
3.2. Numerikus módszerek	16
4. Vizsgált jelenségek	18
4.1. SFA-TDSE: kétszeresen differenciális ionizációs valószínűségek összehasonlítása .	19
4.2. Kilépési irány szerint integrált valószínűség-sűrűség - ionizációs spektrum	20
4.3. Elektronhullámcsomagok keletkezése és interferenciája	24
4.4. Elektron-szögeloszlás az ATI gyűrűk mentén	28
Következtetések és továbbfejlesztési lehetőségek	30

Bevezető

A koherens sugárzásból álló rövid impulzusok formájában megjelenő, nagy intenzitású lézerterek hatása összemérhető az elektron és az atommag között ható Coulomb-erőkével az atomi rendszerek dinamikájának vezérlésében. Egy efféle nagy intenzitású lézertérrel kölcsönható atom tehát szélsőséges körülményeknek lesz kitéve, amely következtében új, nemlineáris folyamatokon alapuló jelenségek mennek végbe [1].

Munkánk során lézer-atom kölcsönhatás eredményeképp keletkező elektronhullámcsomagok interferenciáját vizsgáljuk, hangsúlyt fektetve a mögöttes folyamatok fizikai hátterére. Az eddigi, úgy elméleti, mint kísérleti kutatások többnyire a pár félciklusú lézerimpulzusok alkalmazásából származó elektronhullámcsomagok kölcsönhatását rögzítették [2, 3, 4, 5, 6]. E korábbi kutatások kimutatták, hogy az egymástól eltérő térbeli és időbeli trajektóriát bejáró elektronhullámcsomagok interferálnak, létrehozva az úgynevezett fotoelektron hologramokat. A legismertebb ezek közül a "pók", amelyet magas fotoelektron energiáig nyúló, a polarizációs tengellyel szinte párhuzamos széles sávok jellemzik. Megemlíthető a "legyező" struktúra is, amely a radiális interferenciasávok alapján ismerhető fel, illetve a "halcsont", amelyben az interferenciasávok közel merőlegesek a polarizációs irányra.



1. ábra. Balról jobbra haladva a "pók" ("spider"), "legyező" ("fan") és "halcsont" ("fishbone") struktúrák [7].

Figyelmünk a sokciklus határesetre irányul, amikor is egy hosszabb lézerimpulzus kölcsönhatását vizsgáljuk adott célatommal, tanulmányozva ilyen esetben hogyan változik az interferenciaminták struktúrája és milyen fizikailag értelmezhető folyamatok állnak emögött. Mivel egy hosszú lézerimpulzus sok információ feldolgozását jelenti, megközelítésünk alapját egy pár félciklus kiragadása képezi az adott lézerimpulzus közepéből, amely leegyszerűsíti a tanulmányozást és ugyanakkor elegendő az összes releváns jelenség megfigyelésére.

A lézer-atom kölcsönhatásnak egy fontos speciális esete az, amikor a lézer fotonjainak az energiája jóval kisebb, mint az atom ionizációs potenciálja. Ha az intenzitás értéke elég nagy, illetve a frekvenciáé elég kicsi, az ionizáció úgy megy végbe, mintha a lézer kvázi-sztatikus elektromos térrel rendelkezne. Ilyen feltételek mellett célszerű az erős tér közelítést (strong field approximation), a továbbiakban SFA, alkalmazni, amely azt feltételezi, hogy egy aktív elektron, az ionizációt követően csak a lézertérrel hat kölcsön, az ionizált atommal nem [1].

A Schrödinger-egyenlet megoldásával szemben, ami az atomok viselkedésének nagy intenzitású lézerterekben való leírásának standard módszere, az SFA modell nagyobb rugalmasságot biztosít azáltal, hogy lehetőséget ad a köztes lépések vizsgálatára és ekképp az eredmények fizikai értelmezésére.

Dolgozatunk az SFA modell felépítéséhez szükséges elméleti háttér összefoglalásával indít, majd magát a modellt mutatja be. A továbbiakban hidrogén atomra szabjuk az SFA modellt. Levezetjük az átmeneti valószínűségi amplitudóban elvégezhető analitikus számításokat, majd leírjuk számítógépes szimulációként implementált, a valószínűségi amplitudó teljes értékének kiszámításához alkalmazott numerikus módszereket. Az utolsó fejezet az eredmények kiértékelését tartalmazza: megvizsgáljuk az elektronhullámcsomagok keletkezését és interferenciájuk mechanizmusát, a kétszeresen differenciális ionizációs valószínűségeket és a sokfoton-ionizációs spektrumokat, és mindezt összehasonlítjuk az időfüggő Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásából kapott eredményekkel.

1. Elméleti háttér

1.1. Sokfoton jelenségek

1963-ban figyelték meg először a sokfoton-ionizáció (multiphoton ionization, MPI) jelenségét, amely során egy atomi rendszer, az ionizációs potenciálnál kisebb energiájú fotonok közel egyidejű elnyelésével tesz szert az ionizációhoz szükséges energiára [8]. Később felfedezték, hogy megfelelően magas intenzitásokon ($I > 10^{11} \text{ W cm}^{-2}$) a kibocsátott elektron az ionizációhoz szükséges minimális számot meghaladó számú fotont képes elnyelni, e jelenség neve pedig küszöb feletti ionizáció (above-threshold ionization, ATI). Ilyen esetben a kapott fotoelektron spektrumon csúcsok figyelhetőek meg [1].

Amennyiben a frekvencia értéke elég alacsony, a lézerintenzitás pedig megfelelően erős, az ionizáció egy kvázi-statikuss modell segítségével értelmezhető. Keldysh kvázi-statikuss elmélete az SFA-t alkalmazza, amely azt feltételezi, hogy az ionizált elektron csak a lézertérrel hat kölcsön, az ionizált atommal nem. Egy fontos mennyisége az elméletnek a Keldysh-paraméter:

$$\gamma_K = \left(\frac{I_P}{2U_p} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (1)$$

ahol I_P az ionizációs potenciál, U_p pedig a ponderomotív energia, amelyről a későbbiekben lesz szó [1].

Ha $\gamma_K \lesssim 1$, az alagúthatás dominál az atomi potenciál és a lézertér egymástratevődéséből létrejövő effektív potenciálon keresztül, ha pedig $\gamma_K \gtrsim 1$, a domináns ionizációs mechanizmus az MPI [1].

1.2. Elektron klasszikus nemrelativisztikus dinamikája lézertérben

Az elektron lézertérben való mozgásának relativisztikus dinamikáját leíró Lorentz-egyenlet:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{p}_{kl} = -e [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)], \quad (2)$$

ahol $\mathbf{p}_{kl} = \gamma m \mathbf{v}$, m az elektron tömege, \mathbf{v} a sebessége, $\gamma = (1 - \frac{v^2}{c^2})^{\frac{1}{2}}$ pedig a Lorentz-faktor [1].

Az elektron mikroszkopikus mozgásának vizsgálatára bevezetjük a nemrelativisztikus, nagy hullámhosszak tartományában érvényes Lorentz-egyenlet közelítő alakját, amely (2) összefüggés alapján:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{v} = -\frac{e}{m} \mathbf{E}(\mathbf{r}_0, t) \quad (3)$$

A fenti közelítésben elsősorban azt feltételeztük, hogy az alkalmazások nagy részében az intenzitás olyan mértékű, hogy a nemrelativisztikus leírás indokolt, $\gamma = 1$, illetve azokra az esetekre korlátozódunk, amelyekben az elektron kezdeti sebességének értéke biztosítja azt, hogy az elmozdulása a terjedési irányban jóval kisebb, mint a lézer hullámhossz [1].

A (3) összefüggés alapján egy, a t_0 időpillanatban \mathbf{v}_0 kezdősebességgel rendelkező elektron sebessége:

$$\begin{aligned}\mathbf{v}(t) &= -\frac{e}{m} \int_{t_0}^t \mathbf{E}(\mathbf{r}_0, t') dt' + \mathbf{v}_0 \\ &= \frac{e}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}_0, t) - \frac{e}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}_0, t_0) + \mathbf{v}_0\end{aligned}\quad (4)$$

Az $m\mathbf{v}$ mennyiséget kinetikus impulzusnak nevezzük, bevezetve a kanonikus impulzust is, mint $\mathbf{p}(t) = m\mathbf{v}(t) - e\mathbf{A}(\mathbf{r}_0, t)$, a fenti egyenlet a következő alakba írható:

$$\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}(t_0),$$

ami az impulzusmegmaradást fejezi ki a nagy hullámhossz közelítésben. Az elektron klasszikus mozgása lézertérben tehát egy driftmozgás és egy rezgőmozgás szuperpozíciója. Az előbbit a $\mathbf{v}_d = \frac{\mathbf{p}(t_0)}{m} = \mathbf{v}_0 - \frac{e}{m} \mathbf{A}(\mathbf{r}_0, t_0)$ driftsebesség, míg az utóbbit az $\frac{e\mathbf{A}(\mathbf{r}_0, t)}{m}$ rezgési sebesség jellemez. Ezek alapján, a (4) összefüggést integrálva egy, a t_0 időpillanatban \mathbf{r}_0 helyzetvektorú elektronra:

$$\mathbf{r}(t) = \boldsymbol{\alpha}(t, t_0) + \mathbf{v}_d(t - t_0) + \mathbf{r}_0,$$

ahol

$$\boldsymbol{\alpha}(t, t_0) = \frac{e}{m} \int_{t_0}^t \mathbf{A}(\mathbf{r}_0, t') dt' \quad (5)$$

az elektron rezgés miatti kitérésvektora [1].

Egy nemrelativisztikus elektron mikroszkopikus mozgásának tanulmányozásakor homogén lézerteret feltételezhetünk, ilyen feltételek mellett viszont a szabad elektron nem tehet szert eredő elmozdulásra vagy sebességre. Az ATI spektrumok értelmezéséhez szükséges az elektron makroszkopikus dinamikájának a figyelembevétele is, azaz hogy milyen folyamatok zajlanak le amiután elhagyja a lézerfókuszot, ehhez pedig már szem előtt kell tartani a lézerimpulzus intenzitásának térbeli változását. Elhanyagolva az elektron és az ionizált atom közötti kölcsönhatást, a lézerimpulzus véges ideje, illetve a lézer-atom kölcsönhatási térbe való fókuszálása miatti térbeli inhomogenitások fogják befolyásolni az elektrondinamikát [1].

Az elektron rezgőmozgásából adódik egy U_p ponderomotív energia, amely egy szabad elektron, egy lézerciklusra kiátlagolt mozgási energiája, ha a driftsebessége nulla a lézertérben.

Monokromatikus sugárzás esetén:

$$U_p = \frac{e^2 E_0^2}{4m\omega^2} \quad (6)$$

A tér inhomogenitásából származik egy ponderomotív erő:

$$\begin{aligned} m \frac{d}{dt} \Delta \mathbf{v} &= -\frac{e^2}{2m\omega^2} \nabla \overline{E^2(\mathbf{r}, t)}|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_0} \\ &= -\nabla U_p(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_0}, \end{aligned}$$

ahol $\Delta \mathbf{v}$ a kitérés sebesség, $U_p(\mathbf{r})$ pedig a ponderomotív potenciál, mivel az \mathbf{r}_0 környékén az elektron átlagban úgy mozog, mintha a potenciális energiája az \mathbf{r}_0 -beli ponderomotív energiájával lenne egyenlő. Az $U_p(\mathbf{r})$ hatására tehát az elektron a kisebb intenzitások fele mozdul el, kilökődik a lézerfókuszból, és mivel így eltávolodik az atommagtól, a későbbiekben jogos lesz az atomi potenciál elhanyagolása [1].

1.3. Dipól közelítés

Amennyiben azt feltételezzük, hogy a lézerhullámhossz nagy a tanulmányozott atomi rendszer méreteihez képest és az intenzitás nem akkora mértékű, hogy a nemdipól hatások jelentősek legyenek, a dipól közelítés alkalmazható, amely elhanyagolja a lézertér térbeli változását atomi skálán. Ilyen feltételek mellett, ha az atom magjának a pozíciója \mathbf{r}_0 , az $\mathbf{A}(\mathbf{r}_0, \mathbf{t}) = \mathbf{A}(t)$ vektorpotenciál térben homogén és automatikusan teljesülnek a Coulomb-mérték feltételei. Ekképp:

$$\mathbf{E}(t) = -\frac{d}{dt} \mathbf{A}(t),$$

a $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ mágneses tér pedig eltűnik [1].

Ekkor egy klasszikus elektron rezgőmozgásából adódó, a rezgési centrumhoz vonatkoztatott kitérésvektora:

$$\boldsymbol{\alpha}(t) = \frac{e}{m} \int_{-\infty}^t \mathbf{A}(\mathbf{t}') dt' \quad (7)$$

A dipól közelítésben, az elektron elektromágneses térrel való kölcsönhatását leíró Hamilton-operátor alakjának leegyszerűsítésére is lehetőség van, mértéktranszformáció segítségével. Az elektromágneses térben levő elektron nemrelativisztikus Hamilton-operátorának standard alakja, a $\phi(\mathbf{r}, t)$ skalár- és $A(\mathbf{r}, t)$ vektorpotenciál függvényében:

$$\begin{aligned} H(t) &= \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - e\phi \\ &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{e}{2m} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2 - e\phi \end{aligned}$$

Az időfüggő Schrödinger-egyenlet, hidrogénszerű atomra:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V - i\hbar \frac{e}{2m} (\mathbf{A} \cdot \nabla + \nabla \cdot \mathbf{A}) + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2 - e\phi \right] \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (8)$$

A (8) egyenlet egy fontos tulajdonsága, hogy a kvantummechanikai mértéktranszformáció során alakja változatlan marad. Amennyiben a következő transzformációkat végezzük el:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla f \\ \phi &\rightarrow \phi' = \phi - \frac{\partial f}{\partial t} \\ \Psi &\rightarrow \Psi' = \exp(-ief/\hbar) \Psi \end{aligned}$$

az $f = -\mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{r}$ függvényt alkalmazva, az úgynevezett hossz mértékben felírt időfüggő Schrödinger-egyenletet kapjuk meg. Ekkor:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}' &= 0 \\ \phi' &= -\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r} \\ \Psi^L(\mathbf{r}, t) &= \exp\left[\frac{ie}{\hbar} \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{r}\right] \Psi(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

és hossz mértékben az időfüggő Schrödinger-egyenlet:

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

ahol $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V$ és $H_{int}^L(t) = e\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r}$ [1].

1.4. Az evolúciós operátor

A lézer-atom kölcsönhatás tanulmányozásának standard módszere az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldása:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle \quad (9)$$

A nem egzakt módszerekhez fordulva viszont, számos modell (köztük az SFA is) alapszik az evolúciós operátor közelítő alakjának meghatározására. Az evolúciós operátor bevezethető, mint:

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\Psi(t_0)\rangle, \quad (10)$$

és a következő kezdeti feltételt teljesíti:

$$U(t_0, t_0) = I, \quad (11)$$

ahol I az egység operátor [1].

A (9) és (10) összefüggésekből következik, hogy az evolúciós operátorra felírható a következő egyenlet:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) = H(t)U(t, t_0) \quad (12)$$

A (12) differenciálegyenlet, a (11) kezdeti feltétellel együtt helyettesíthető egy Volterra-integrálegyenlettel:

$$U(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t_1)U(t_1, t_0)dt_1, \quad (13)$$

illetve mivel $U^\dagger(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0) = U(t_0, t)$, az evolúciós operátor a következő egyenletet is teljesíti [1]:

$$U(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t U(t, t_1)H(t_1)dt_1 \quad (14)$$

1.5. Gordon-Volkov hullámfüggvények

Az SFA az ionizációt követően az elektront szabadnak tekinti, azaz nem hat kölcsön az atomi potenciállal. Ekképp az elektronállapotok ionizáció után Gordon-Volkov hullámfüggvényekkel jellemezhetőek, amelyek megoldásai a szabad elektronra felírt Schrödinger-egyenletnek. Ezek alakja hossz mértékben, a hullámszám-vektor térben [9]:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^V(\mathbf{r}, t) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} [\hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A}(t)] \cdot \mathbf{r} - \frac{i}{2m\hbar} \int_{-\infty}^t [\hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A}(t')]^2 dt' \right\} \quad (15)$$

A Gordon-Volkov evolúciós operátor:

$$U_F(t, t_0) = \int d\mathbf{k} |\Psi_{\mathbf{k}}^V(t)\rangle \langle \Psi_{\mathbf{k}}^V(t_0)|, \quad (16)$$

ahol $|\Psi_{\mathbf{k}}^V(t)\rangle$ és $\langle \Psi_{\mathbf{k}}^V(t_0)|$ Gordon-Volkov állapotvektorok adott időpillanatokban [1].

2. Erős tér közelítés

Az egy-elektron közelítésből indulunk ki, amely helyettesíti a lézertérben levő atomot egy elektronnal, amely kölcsönhat a lézertérrel és egy effektív potenciál által kötött, amely leírja az aktív elektron és az atom többi része közötti átlagolt kölcsönhatást [9]. A rendszer Hamilton-operátora felírható, mint:

$$H(t) = T + V + H_{int}(t), \quad (17)$$

ahol T a elektron mozgási energia operátora, a V potenciál írja le az elektronnak az atomi ionnal való kölcsönhatását, $H_{int}(t) = e \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t)$ pedig az elektron-lézertér kölcsönhatását leíró Hamilton-operátor [1]. Gyenge külső tér esetén a maggal való kölcsönhatás dominál, így a térrel való kölcsönhatás perturbációnak tekinthető, ennek eredménye a hagyományos perturbációs elmélet. SFA esetén a lézerintenzitás elég nagy ahhoz, hogy a Coulomb-kölcsönhatást lehessen perturbációnak tekinteni, ez az erős tér perturbációs elmélet kerül a továbbiakban bemutatásra.

Kihasználva, hogy a Hamilton-operátor felbontható a "nemperturbált" és a perturbációnak számított atomi potenciállal való kölcsönhatást leíró (V) tagok összegére, az $U(t, t')$ evolúciós operátorra a következő két egyenletet lehet felírni:

$$U(t, t') = U_F(t, t') - i \int_{t'}^t U_F(t, t'_1) V U(t'_1, t') dt'_1$$

$$U(t, t') = U_F(t, t') - i \int_{t'}^t U(t, t'_1) V U_F(t'_1, t') dt'_1$$

A fenti egyenletek, végtelen sor formájában felírt megoldása:

$$U(t, t') = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{U}^{(n)}(t, t'), \quad (18)$$

amelynek az első tagja a $\bar{U}^{(0)}(t, t') = U_F(t, t')$ Gordon-Volkov evolúciós operátor, míg a többi tag [1]:

$$\bar{U}^{(n)}(t, t') = (-i)^n \int_t^{t'} dt'_1 \int_{t'}^{t'_1} dt'_2 \dots \int_{t'}^{t'_{n-1}} dt'_n$$

$$\times U_F(t, t'_1) V U_F(t'_1, t'_2) V \dots U_F(t'_{n-1}, t'_n) V U_F(t'_n, t'), \quad n \geq 1 \quad (19)$$

A (9) egyenlet formális megoldása megadható mint:

$$|\Psi(t)\rangle = |\phi_0(t)\rangle - i \int_{t_0}^t dt' U(t, t') H_{int}(t') |\phi_0(t')\rangle, \quad (20)$$

ahol a kezdeti állapot $|\Psi_0(t_0)\rangle = |\phi_0(t_0)\rangle = |\psi_0\rangle \exp(-iE_0t_0/\hbar)$ a nemperturbált időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldása és amelybe helyettesítve a (18) összefüggést [1]:

$$|\Psi(t)\rangle = |\phi_0(t)\rangle + \sum_{n=0}^{\infty} |\bar{\Psi}^{(n)}(t)\rangle, \quad (21)$$

ahol:

$$|\bar{\Psi}^{(n)}(t)\rangle = -i \int_{t_0}^t dt' \bar{U}^{(n)}(t, t') H_{int}(t') |\phi_0(t')\rangle \quad (22)$$

Az evolúciós operátor (18) összefüggéséhez hasonlóan, az $M = \langle \phi(t) | \Psi(t) \rangle$ módon értelmezett, a $|\Psi(t)\rangle$ kezdeti állapotból a $\langle \phi(t) |$ végső állapotba való átmenethez rendelhető valószínűségi amplitudó is a következő alakba írható:

$$M = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{M}^{(n)} \quad (23)$$

Felhasználva a (19), (22) egyenleteket, illetve, hogy $\bar{U}^{(0)}(t, t') = U_F(t, t')$, a sor első tagja:

$$\bar{M}^{(0)} = -i \int_{t_0}^{t_1} dt' \langle \Psi_{\mathbf{k}}^V(t') | H_{int}(t') |\phi_0(t')\rangle, \quad (24)$$

míg a többi:

$$\begin{aligned} M^{(n)} &= \langle \phi(t_1) | \bar{\Psi}^{(n)}(t_1) \rangle \\ &= (-i)^{n+1} \int_{t_0}^{t_1} dt' \int_{t'}^{t_1} dt'_1 \int_{t'}^{t'_1} dt'_2 \dots \int_{-\infty}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} \\ &\quad \times \langle \Psi_{\mathbf{k}}^V(t') | V U_F(t'_1, t'_2) V \dots U_F(t'_{n-1}, t'_n) V U_F(t'_n, t') H_{int}(t') |\phi_0(t')\rangle, \quad n \geq 1 \end{aligned} \quad (25)$$

Az SFA akkor alkalmazható, amikor a lézer körfrekvencia alacsony, illetve az intenzitás elég nagy ahhoz, hogy az (1) összefüggés által megadott $\gamma_k \lesssim 1$ [1]. Ekkor, lineárisan polarizált sugárzás esetén az ionizációs ráta nemlineáris függvénye az $\mathbf{E}(t)$ térerősségvektor modulusának, éles maximumokat mutat, amikor $|\mathbf{E}(t)|$ is maximális értékű, így pedig hullámcsomagok többnyire kétszer keletkeznek egy lézerciklus alatt [7].

Amennyiben az ionizálódott elektron további kölcsönhatások nélkül ér a detektorhoz, direkt elektronnak nevezik, ha pedig a lézertér visszatéríti és ütközik az ionizált atommal, szórt elektronnak van szó [7]. A (21) összefüggés mindkét említett esetet magába foglalja. Az egyenlet jobb oldalának első tagja egyszerűen az időbeli evolúciót szenvedett kezdeti állapot. A második, ahol $n = 0$, a direkt ionizáció hozzájárulását adja, azaz azt írja le, hogy a kezdeti állapot

kölcsönhat t' időpillanatban a lézertérrel és Gordon-Volkov hullámfüggvények szuperpozíciójába megy át. Az $n \geq 1$ -nek megfelelő tagok az ionnal való ütközések kontribúcióját tartalmazzák. A keletkezett állapot-szuperpozíció szabad elektronként evolvál az $U_F(t'_n, t')$ Gordon-Volkov evolúciós operátornak megfelelően, majd kölcsönhat az ionnal t'_n időpillanatban. A folyamat hasonló az n darab ütközésre, a teljes hozzájárulás az állapotvektorhoz pedig megkapható az összes lehetséges $t'_n, t'_{n-1}, \dots, t'_1$ ütközési időpillanatra való integrálással [1].

A (24) egyenlet szolgál majd alapul számításainknak, ez felel meg az SFA elsőrendű közelítésnek, amely a direkt ionizációhoz tartozó átmeneti valószínűségi amplitudót adja meg.

3. Elsőrendű SFA modell hidrogén atomra

3.1. Analitikus számítások

Amennyiben hidrogén atomot tekintünk, a (24) alakban felírt valószínűségi amplitudóban, atomi egységekben kifejezve:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^V(\mathbf{r}, t) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\beta(\mathbf{k}, t)} e^{i(\mathbf{A}(t)+\mathbf{k})\mathbf{r}},$$

ahol $e^{i\beta(\mathbf{k}, t)} = -\frac{i}{2} \int_{-\infty}^t [\mathbf{k} + \mathbf{A}(t')]^2 dt'$. A második exponenciális tagot gömbfüggvényekkel felírva [10]:

$$e^{i[\mathbf{A}(t)+\mathbf{k}]\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l_1=0}^{\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} i^{l_1} j_{l_1}(|\mathbf{k}'| \cdot |\mathbf{r}|) Y_{l_1}^{m_1}(\Omega_{\mathbf{k}'}) Y_{l_1}^{m_1*}(\Omega_{\mathbf{r}}),$$

ahol $\mathbf{k}' = \mathbf{A}(t) + \mathbf{k}$, j_{l_1} szférikus Bessel-függvény, illetve $Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_l^{m*}(\theta, \phi)$ módon értelmezett a gömbfüggvények komplex konjugálása.

A kezdeti állapot (24)-ben:

$$|\phi_0(t_0)\rangle = \frac{R_{nl_2}(r)}{r} Y_{l_2}^{m_2}(\Omega_{\mathbf{r}}),$$

ahol $R(r)$ a hidrogén atom hullámfüggvényének radiális része, míg a $Y_{l_2}^{m_2}(\Omega_{\mathbf{r}})$ gömbfüggvény a szögfüggést tartalmazza.

Felhasználva, hogy atomi egységekben:

$$H_{int}(t) = \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t) = rE(t)\cos(\theta)$$

$$Y_1^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos(\theta),$$

a valószínűségi amplitudóra kapott összefüggés:

$$\begin{aligned} M = & i\sqrt{\frac{8}{3}} \int_{t_0}^{t_1} dt' e^{i\beta(\mathbf{k}, t')} E(t') \sum_{l_1=0}^{\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} (-i)^{l_1} Y_{l_1}^{m_1*}(\Omega_{\mathbf{k}'}) \int_{\{r\}} dr j_{l_1}(k' \cdot r) R_{nl_2}(r) r^2 \\ & \times \int_{\{\Omega_{\mathbf{r}}\}} d\Omega_{\mathbf{r}} Y_{l_1}^{m_1}(\Omega_{\mathbf{r}}) Y_1^0(\Omega_{\mathbf{r}}) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega_{\mathbf{r}}) \end{aligned} \quad (26)$$

A (26) egyenlet jobb oldalán az utolsó, szög szerinti integrált Wigner-féle 3-j szimbólumok

segítségével felírva [11]:

$$\begin{aligned} I_{\Omega} &= \int_{\{\Omega\}} Y_{l_1}^{m_1}(\Omega_{\mathbf{r}}) Y_1^0(\Omega_{\mathbf{r}}) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega_{\mathbf{r}}) d\Omega_{\mathbf{r}} \\ &= \sqrt{\frac{(2l_1 + 1)3(2l_2 + 1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_1 & 1 & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & 1 & l_2 \\ m_1 & 0 & m_2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

A 3-j szimbólumok kiválasztási szabályai alapján $m_1 = -m_2$, illetve $|l_2 - 1| \leq l_1 \leq |l_2 + 1|$ és $l_1 \neq l_2$, így a

$$W(\mathbf{k}, t') = \sum_{l_1=0}^{\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{l_1} (-i)^{l_1} Y_{l_1}^{m_1*}(\Omega_{\mathbf{k}'}) \int_{\{r\}} dr j_{l_1}(k' \cdot \mathbf{r}) R_{nl_2}(r) r^2 \int_{\{\Omega_{\mathbf{r}}\}} d\Omega_{\mathbf{r}} Y_{l_1}^{m_1}(\Omega_{\mathbf{r}}) Y_1^0(\Omega_{\mathbf{r}}) Y_{l_2}^{m_2}(\Omega_{\mathbf{r}})$$

rész a következő alakot ölti:

$$\begin{aligned} W(\mathbf{k}, t') &= (-i)^{l_2-1} Y_{l_2-1}^{-m_2*}(\Omega_{\mathbf{k}'}) \sqrt{\frac{3(2l_2-1)(2l_2+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_2-1 & 1 & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2-1 & 1 & l_2 \\ -m_2 & 0 & m_2 \end{pmatrix} \\ &\times \int_{\{r\}} dr j_{l_2-1}(|\mathbf{k}'| \cdot |\mathbf{r}|) \cdot R_{nl_2}(r) r^2 + (-i)^{l_2+1} Y_{l_2+1}^{-m_2*}(\Omega_{\mathbf{k}'}) \sqrt{\frac{3(2l_2+3)(2l_2+1)}{4\pi}} \\ &\times \begin{pmatrix} l_2-1 & 1 & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_2-1 & 1 & l_2 \\ -m_2 & 0 & m_2 \end{pmatrix} \int_{\{r\}} dr j_{l_2+1}(|\mathbf{k}'| \cdot |\mathbf{r}|) \cdot R_{nl_2}(r) r^2 \end{aligned} \quad (27)$$

Gömbfüggvényekkel dolgozva indokolt polárkoordináta-rendszerben felírni a hullámszámvektort és a vektorpotenciált, így pedig a $\mathbf{k}' = \mathbf{A} + \mathbf{k}$ módon értelmezett hullámszámvektort a következő polárkoordináták jellemzik:

$$\begin{aligned} \cos(\theta_{\mathbf{k}'}) &= \frac{(k+A)_z}{k'} = \frac{k \cos(\theta_k) + A \cos(\theta_A)}{\sqrt{k^2 + A^2 + 2kA f(\theta_k, \varphi_k, \theta_A, \varphi_A)}} \\ \operatorname{tg}(\varphi_{\mathbf{k}'}) &= \frac{(k+A)_y}{(k+A)_x} = \frac{k \sin(\theta_k) \sin(\varphi_k) + A \sin(\theta_A) \sin(\varphi_A)}{k \sin(\theta_k) \cos(\varphi_k) + A \sin(\theta_A) \cos(\varphi_A)}, \end{aligned}$$

ahol $f(\theta_k, \varphi_k, \theta_A, \varphi_A) = 2kA[\sin(\theta_k) \cos(\varphi_k) \sin(\theta_A) \cos(\varphi_A) + \sin(\theta_k) \sin(\varphi_k) \sin(\theta_A) \sin(\varphi_A) + \cos(\theta_k) \cos(\theta_A)]$.

3.2. Numerikus módszerek

A (26) formában felírt átmeneti valószínűségi amplitudóban a radiális, illetve idő szerinti integrál elvégzéséhez numerikus módszerekhez fordulunk.

A radiális integrált Python beépített függvény számítja, ezt felhasználva végzünk konvergencia

tesztet az integrálási tartomány meghatározására: változtatva a tartomány felső határát, az integrálértékek összehasonlításra kerülnek addig, amíg egy előre meghatározott hibahatáron belülre nem kerül a közöttük levő eltérés.

Az idő szerinti integrálás elvégzéséhez elsősorban felépítünk egy lézerimpulzust, amely két periódusnyi hosszal rendelkezik. Az elektromos térerősség értékét, adott időpillanatban megadó összefüggés:

$$E(t) = E_0 \sin(\omega t) \quad (28)$$

Ahhoz, hogy ez valódi lézerimpulzusként viselkedjen, azaz a térerősség modulusának maximumakor a vektorpotenciál értéke nulla legyen, ki kell bővíteni az elejét és a végét egy-egy félciklussal. Ezek amplitúdója és körfrekvenciája úgy lett megválasztva, hogy kétciklusú impulzusmagunkhoz képest ne okozhasson lényeges ionizációt.

Az idő szerinti integrálás tartományát egyenlő közű rácstra felosztva, majd minden intervallumot újabb alintervallumokra bontva, a számítógépes szimuláció előre kiszámítja a térerősség és a vektorpotenciál, illetve az $e^{i\beta(\mathbf{k}, t)}$ függvénybeli $\int_{\{t\}} A(t') dt'$ és $\int_{\{t\}} A^2(t') dt'$ integrálok értékét a rácspontokban, Simpson-módszerrel. Újabb konvergenciatesztek szükségesek ezen lépések elvégzésekor: meg kell határozni hány intervallumra osztandó az idő szerinti integrálási tartomány, amely megadja a valószínűségi amplitudóban a végső integrálási lépéshosszt, illetve az alintervallumok számát egy időlépésen belül, amely a térerősség integrálásakor alkalmazott lépéshosszt határozza meg.

A (27) összefüggés alapján definiált $W(\mathbf{k}, t')$ számítása erőforrás-igényes, de explicit módon csak az $A(t')$ értéktől függ, így nem szükséges $W(\mathbf{k}, t')$ kiszámolása minden időpillanatban. Ehelyett a $W(\mathbf{k}, t')$ -re egy függvénytablát állítunk össze a vektorpotenciál szélsőértékei között, majd erre spline interpolációs függvényt építünk. Ez az eljárás lényegesen lecsökkenti a programunk végrehajtási idejét. A függvénytábla elkészítése újabb konvergenciatesztet igényel, mivel a vektorpotenciál szélsőértékei közötti intervallumot osztjuk fel adott lépéshosszal, mindegyikben kiszámítva a $W(\mathbf{k}, t')$ értékét. A lépéshossz meghatározására folyamatosan hasonlítjuk a summázás egzakt értékét az interpolációból kapott értékkel, amíg a meghatározott hibahatáron belül nem kerülünk.

Végül a szimuláció Simpson-módszert alkalmazva számítja ki az M átmeneti valószínűségi amplitúdót, a kívánt integrálási tartományon.

4. Vizsgált jelenségek

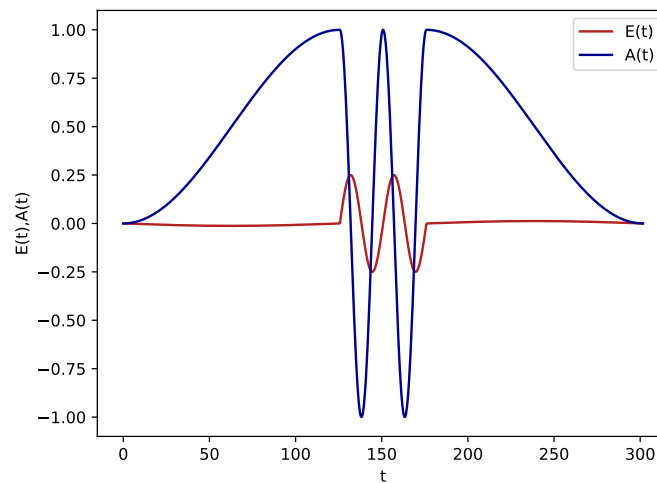
Az időfüggő Schrödinger-egyenlet (TDSE) egzakt megoldása alapján tizenkét térparaméterpár lett kiválasztva. Az $\omega = [0.057, 0.35] a.u.$ intervallumból való minden körfrekvenciára három-három intenzitásra futtatuk le a szimulációt.

Amennyiben végig lineárisan polarizált lézersugárzást feltételezünk, $\theta_A, \varphi_A = 0$, és tetszőleges φ_k érték mellett minden térparaméter-kombinációra több $k - \theta_k$ párosításra ki kell számítani az átmeneti valószínűségi amplitudó értékét, lefedve a θ_k lehetséges értékeinek teljes tartományát ($0^\circ - 180^\circ$) egyenlő közű felbontással. A maximális k érték aszerint kerül megválasztásra, hogy hány sokfoton-ionizációs csúcsot szeretnénk megfigyelni. A jó energiafelbontás érdekében a hullámszámvektor abszolút értékeit egy dE energialépés definiálásán keresztül határozzuk meg:

$$dE = \frac{\omega}{N}$$

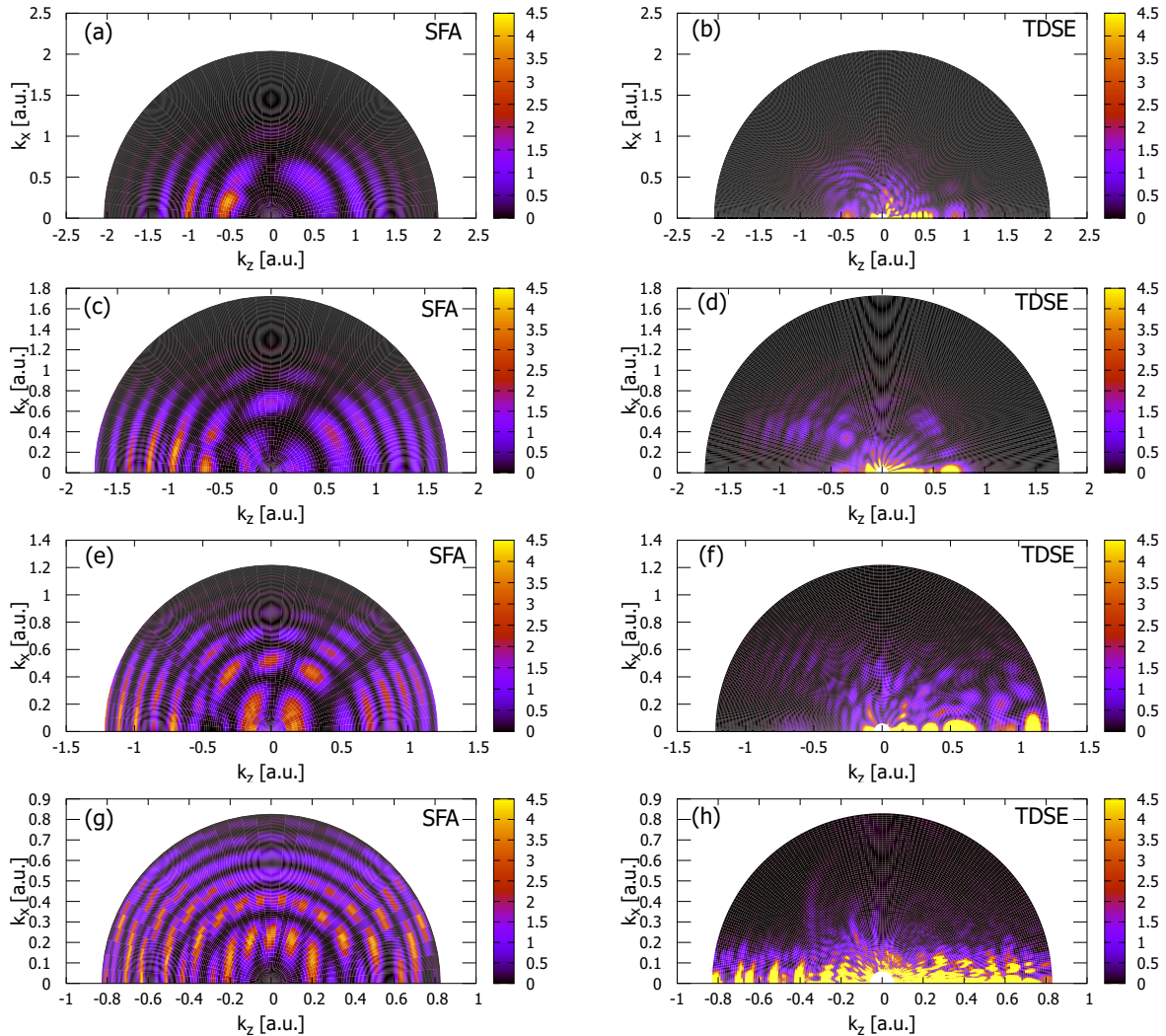
$$k_i = \sqrt{2dE \cdot i} = \sqrt{2E_i},$$

ahol N egy természetes szám és $\frac{i_{max}}{N}$ adja meg a megjelenített sokfoton-ionizációs csúcsok számát.



2. ábra. A szimuláció során használt lézerimpulzus és a belőle származtatott vektorpotenciál alakja. Az $E(t)$ görbén látható a két, egy hosszabb lézerimpulzus közepéből kiemelt periódus, kibővítve a korrekciós félciklusokkal. A két periódus elegendő a releváns jelenségek megfigyeléséhez.

4.1. SFA-TDSE: kétszeresen differenciális ionizációs valószínűségek összehasonlítása



3. ábra. Ionizációs valószínűség-sűrűség a polarizációs iránnyal párhuzamos (k_z) és arra merőleges hullámszámvektor-komponensek függvényében, $\omega = 0.35 \text{ a.u.}$ – $E_0 = 0.25 \text{ a.u.}$ ((a) és (b)), $\omega = 0.25 \text{ a.u.}$ – $E_0 = 0.25 \text{ a.u.}$ ((c) és (d)), $\omega = 0.125 \text{ a.u.}$ – $E_0 = 0.15 \text{ a.u.}$ ((e) és (f)), $\omega = 0.057 \text{ a.u.}$ – $E_0 = 0.1 \text{ a.u.}$ ((g) és (h)) térparaméterekre.

A 3. ábra szemlélteti, ahogyan az SFA esetén nagyon tisztán kirajzolódnak az impulzuseloszlásban koncentrikus gyűrűk, amelyek az impulzusnak a lézertér polarizációs irányával párhuzamos és merőleges komponensei által meghatározott sík origójára centráltak [7]. Ezek a gyűrűk felelnek meg az ATI csúcsoknak és jelzik, hogy a tanulmányozott elektron, a lézertérrel való kölcsönhatás eredményeképp, az ionizációhoz szükséges minimális fotonzámnál többet elnyelt. Az időfüggő Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásából kapott eredmények is visszaadják ezeket a gyűrűket, viszont a szerkezetük sokkal összetettebb. Ez annak tulajdonítható, hogy a TDSE egzakt megoldása figyelembe veszi az elektron újrabefogását és újraszóródását, amelyek új struktúrákat eredményeznek az interferenciamintákban, és amelyek az elsőrendű SFA

modellünkből hiányoznak.

4.2. Kilépési irány szerint integrált valószínűség-sűrűség - ionizációs spektrum

Az ionizációs spektrum kiszámításához kezdetben áttérünk az impulzustérből energiatérbe, így a későbbiekben a sokfoton-ionizációs csúcsok tanulmányozását megkönnyítve. Legyen az impulzustérben felírt M átmeneti valószínűségi amplitudó esetén az ionizációs valószínűsége $P(k, \theta_k) = |M|^2$. Ekkor:

$$P(E, \theta_k) = P(k, \theta_k) \frac{d\mathbf{k}}{d(\hat{\mathbf{k}}E)}, \quad (29)$$

ahol $d\mathbf{k} = k^2 \sin(\theta_k) dk$ és $d(\hat{\mathbf{k}}E) = E^2 \sin(\theta_k) dE$. A (29) egyenlet a következőképpen írható fel:

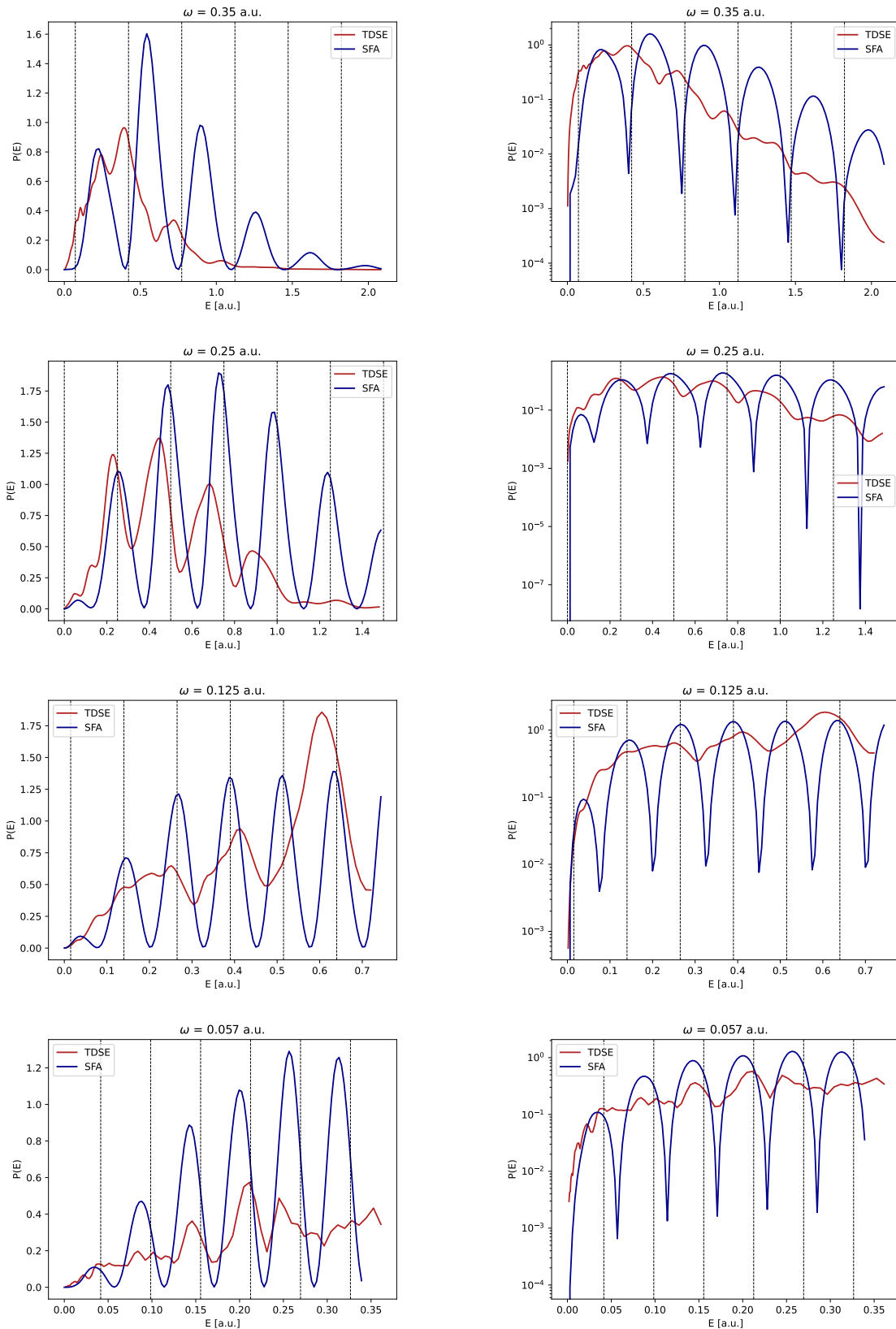
$$P(E, \theta_k) = P(k, \theta_k) \frac{2}{k^2} = |M|^2 \frac{2}{k^2} \quad (30)$$

Ismerve adott végállapotra $P(k, \theta_k)$ -t, a teljes ionizációs valószínűség:

$$P = \int_0^\infty k^2 dk \int_0^\pi d\theta_k \int_0^{2\pi} d\varphi \sin(\theta_k) P(k, \theta_k) \quad (31)$$

A (30) összefüggés kilépési szög szerinti integrálásával eljutunk az ionizációs spektrumot megadó összefüggéshez:

$$P(E) = 2\pi \int_0^\pi \sin(\theta_k) d\theta_k E^2 P(E, \theta_k) \quad (32)$$

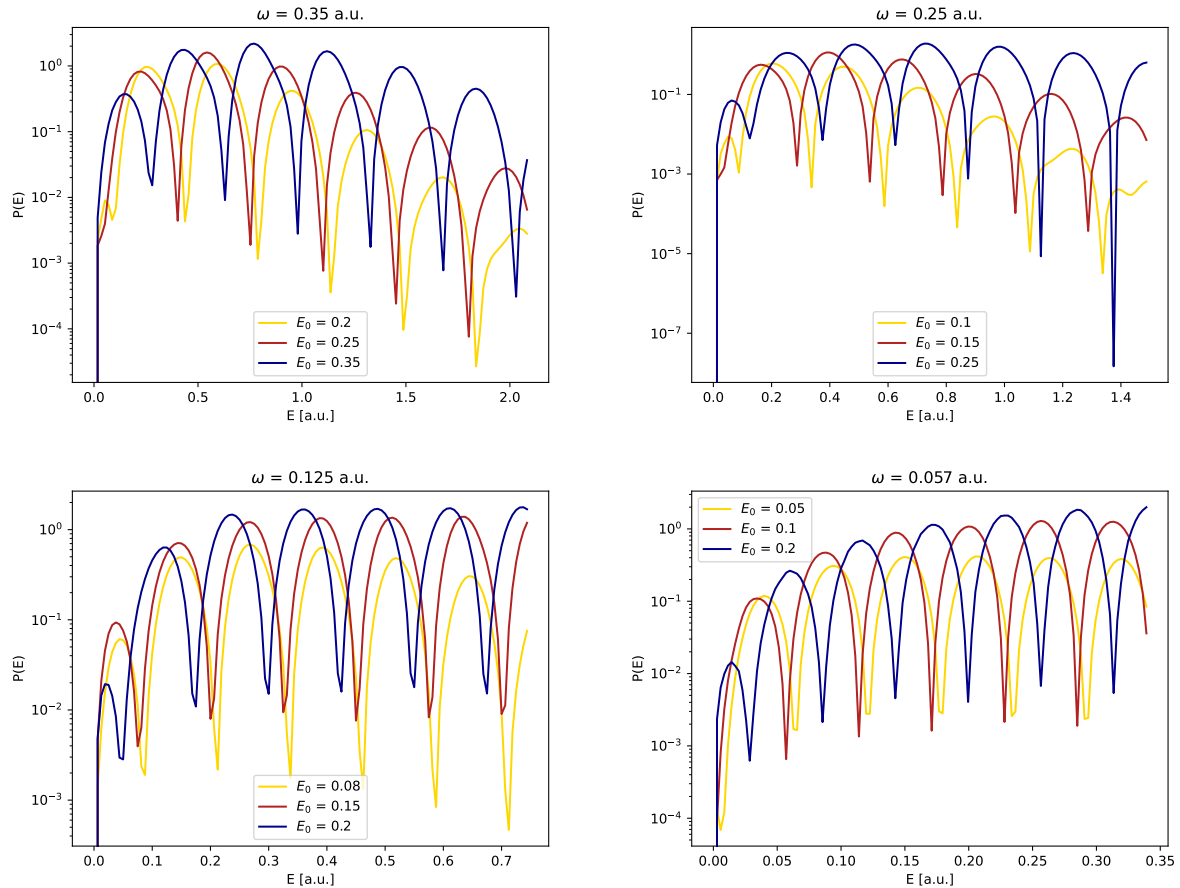


4. ábra. Ionizációs spektrum (ionizációs valószínűség-sűrűség az elektron kilépési energiájának függvényében) összehasonlítása SFA és TDSE esetén, rögzített körfrekvenciára. A függőleges pontozott vonalak jelzik a ponderomotív eltolást figyelembe vevő energiamérleg alapján számított ATI csúcsok helyzetét.

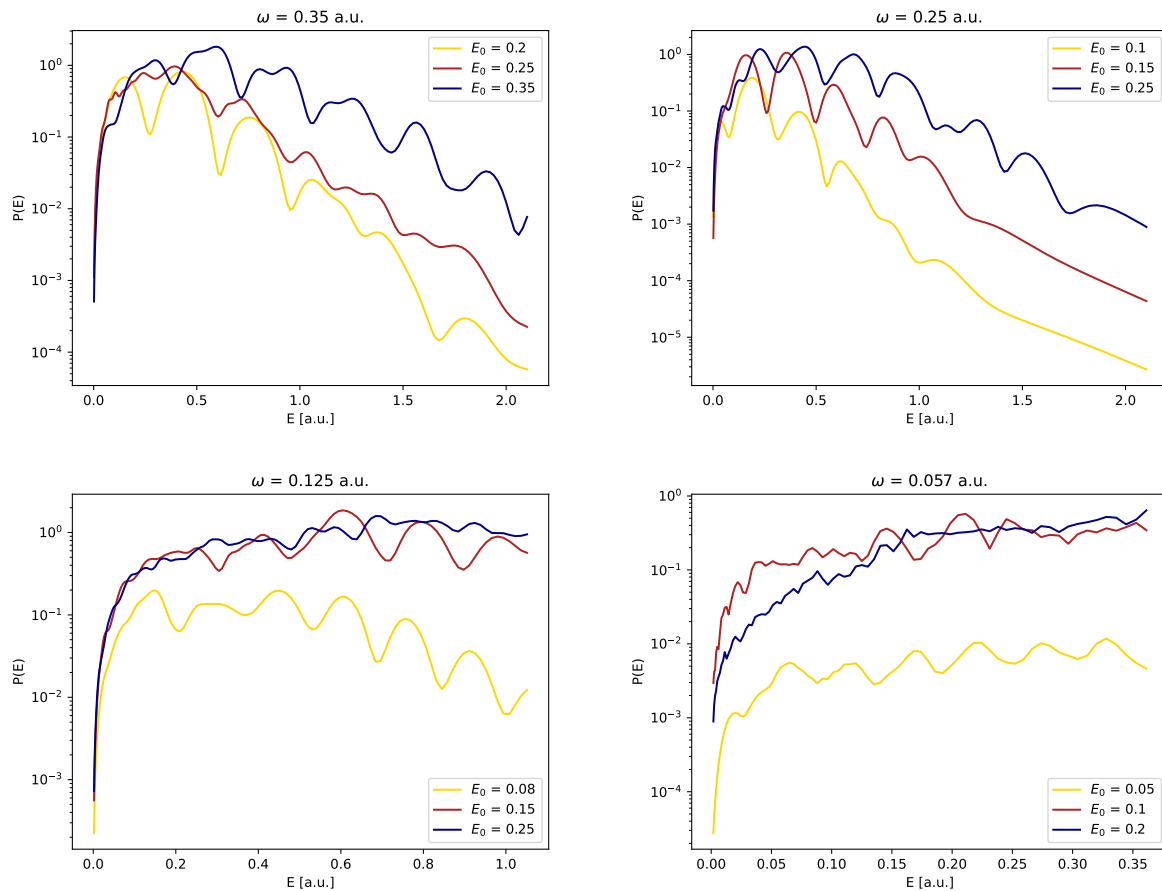
A 4. ábra grafikonjain az ATI csúcsok rajzolódnak ki, legtisztábban az SFA esetében, mivel

nem számol az elektronok újraszóródásával és újrabefogásával, amelyek nyomot hanyagnak az ATI spektrumon. Az ATI csúcsok egymástól egyenlő távolságra jelennek meg, amely értéke a lézer fotonenergiájával, ebben az esetben ω -val, egyezik meg.

Az SFA modellnek megfelelő ATI csúcsok eltolódnak a nagyobb energiák fele a TDSE csúcsokhoz képest, a Coulomb-kölcsönhatás elhanyagolása miatt az ionizációt követően.



5. ábra. Rögzített lézerkörnyék esetén az ionizációs spektrum intenzitástól való függése, SFA modell alapján.



6. ábra. Rögzített lézerkörfrekvencia esetén az ionizációs spektrum intenzitástól való függése, időfüggő Schrödinger-egyenlet egzakt megoldása alapján.

Rögzített körfrekvencia esetén, az SFA és TDSE is azt mutatja, hogy az ionizációs valószínűség függ a lézerintenzitástól, ennek növekedésével az ionizációs valószínűség is nő, amint a 5. és 6. ábrákon látható.

Az SFA ATI csúcsokat vizsgálva, rögzített körfrekvencia esetén megfigyelhetjük azt, hogy az intenzitás növelésével az ATI csúcsok a kisebb energiaértékek fele tolódnak el. Ez egy ismert jelenség, amit az ATI csúcsok ponderomotív eltolásaként ismerünk, és annak tulajdonítható, hogy a lézerimpulzus elektromos tere módosítja az alapállapot energiáját (Stark-eltolás), ami módosítja az ionizáció energiamérlegét [12].

Ha elhanyagoljuk a ponderomotív eltolást, akkor az n fotont elnyelő elektron energiája:

$$E_s = n\omega - I_p, \quad (33)$$

ahol $I_p = 0.5 \text{ a.u.}$ a hidrogén ionizációs potenciálja [12].

A továbbiakban, ha figyelembe vesszük a ponderomotív eltolást, akkor az energiamérlegnek a

következő alakja lesz:

$$E_s = n\omega - I_p - U_p, \quad (34)$$

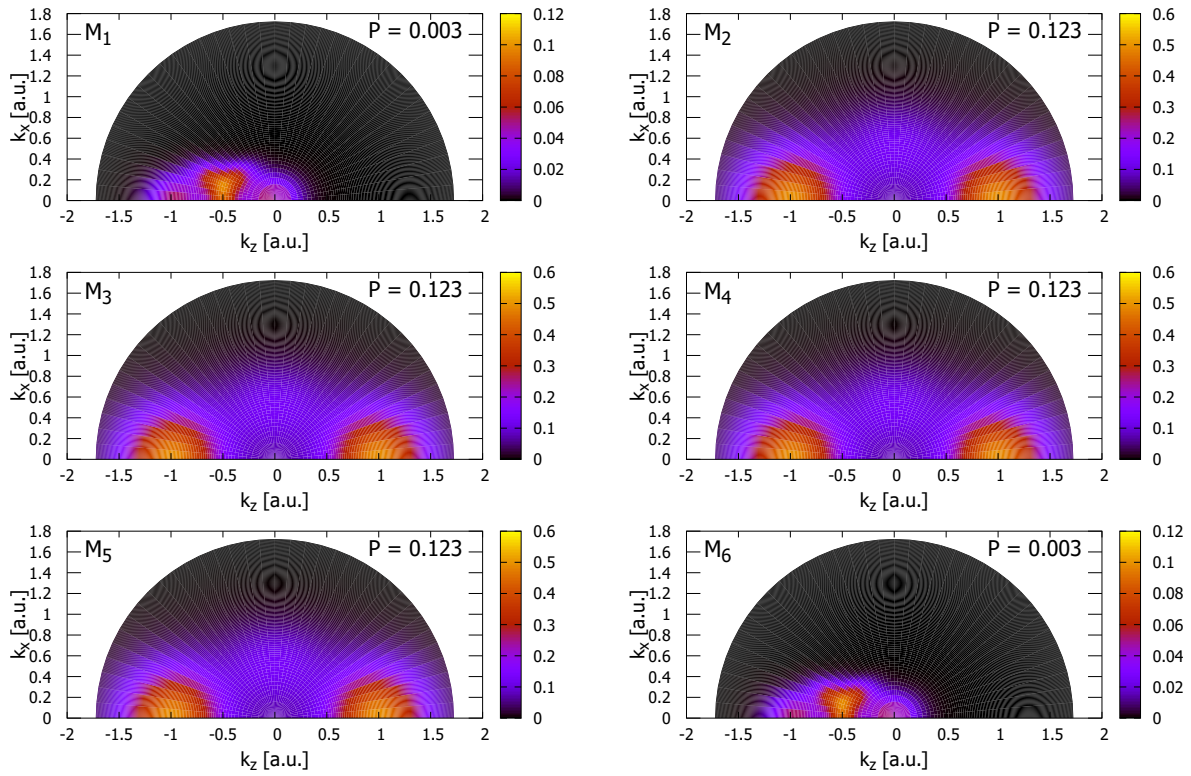
ahol U_p a ponderomotív energia [12]. Ezen energiamérleg által becsült elektron energiák függőleges pontozott vonalként vannak feltüntetve a 4. ábrán.

Látható, hogy modellünk nem tudja visszaadni az ATI csúcsok várható helyzetét minden paraméterpárra, ami várható is, lévén hogy elsőrendű közelítésben alkalmazzuk az SFA-t.

4.3. Elektronhullámcsomagok keletkezése és interferenciája

Az átmeneti valószínűségi amplitudó (24) összefüggésében, az idő szerinti integrál határainak változtatásával kiszámíthatók az egyes lézerfélciklusokhoz tartozó valószínűségi amplitudók. Ehhez a teljes időtartományt a térerősség nullpontjainak megfelelő időpillanatok által határolt intervallumokra bontjuk, és ezen intervallumokon integrálunk külön-külön. Ezen parciális amplitudókat M_i -ként jelöljük, ahol i a félciklus indexe, amelyen belül a parciális amplitudó keletkezett.

A szimulációk eredményeképp hat átmeneti valószínűségi amplitudó értéket kapunk minden egyes $k - \theta_k$ kombinációra, mindegyik egy-egy lézer félperiódust jellemezve. Egy adott végállapothoz (adott az elektron kilépési energiája és kilépési iránya) mindegyik hullámcsomag ad valamilyen hozzájárulást, amelyek koherensen összeadódnak. Mivel ezen hozzájárulásokat jellemző átmeneti valószínűségi amplitudók komplex mennyiségek, ezek koherens szuperpozíciója kioltáshoz vagy egymás erősítéséhez vezet, amely következtében interferenciamintákat kapunk.



7. ábra. $\omega = 0.25 \text{ a.u.}$ - $E_0 = 0.25 \text{ a.u.}$. A struktúramentes ábrák megadják az egyes félciklusokban keletkezett hullámcsomagokat. A hőterképeken feltüntetett átmeneti valószínűségi amplitudó indexe jelzi a hullámcsomag keletkezésének megfelelő félciklust. P az ionizációs valószínűség.

A 7. ábra alapján már látható, hogy az egyes félciklusokban keletkezett hullámcsomagok szerkezete egyszerű, ami egy elvárt tulajdonság, mivel az SFA modell keretén belül egyetlen hullámcsomag keletkezik félciklusonként. Ekképp egy félcikluson belül nem fedezhetőek fel struktúrák, nem alakulhat ki interferencia. Mitöbb, amint a 2. fejezetben említésre került, ezen hullámcsomagok a térerősségvektor modulusának maximuma környékén keletkeznek. Ennek bizonyítására megvizsgáljuk milyen időpillanatok hozzájárulásai dominálnak az egyes félciklusokhoz tartozó átmeneti valószínűségi amplitudó végső értékének kialakításában.

Egy félciklus tanulmányozásakor megkeressük a középhez tartozó t_k^i időpillanatot, mint:

$$t_k^i = \frac{t_i + t_{i+1}}{2},$$

ahol t_i az i . térerősség-nullértékhez rendelhető időpillanat, tehát a félciklus határa. Ezt követően $2 \cdot \Delta t$ ($\Delta t \in [0, \frac{t_{i+1}-t_i}{2}]$) időlépéssel folyamatosan növelve a t_k^i körüli időintervallumot, az M_i -hez való hozzájárulását vizsgáljuk. A (26) egyenletben a következő jelölést alkalmazva:

$$G(t) = i\sqrt{\frac{8}{3}} e^{i\beta(\mathbf{k}, t')} E(t') W(\mathbf{k}, t'),$$

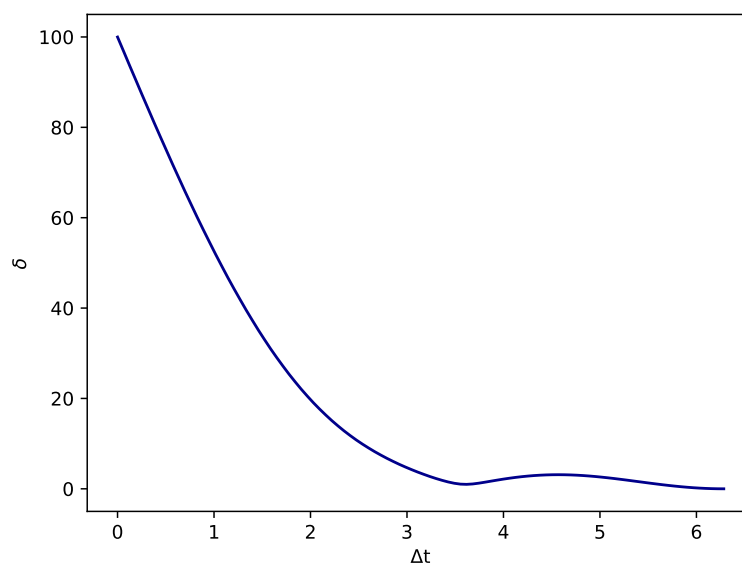
az átmeneti valószínűségi amplitúdó értékének Δt nagyságától való függését a következőképpen értelmezzük:

$$M_i(\Delta t) = \int_{t_k^i - \Delta t}^{t_k^i + \Delta t} G(t) dt$$

Az egyértelmű szemléltetés érdekében definiáljuk a következő mérőszámot:

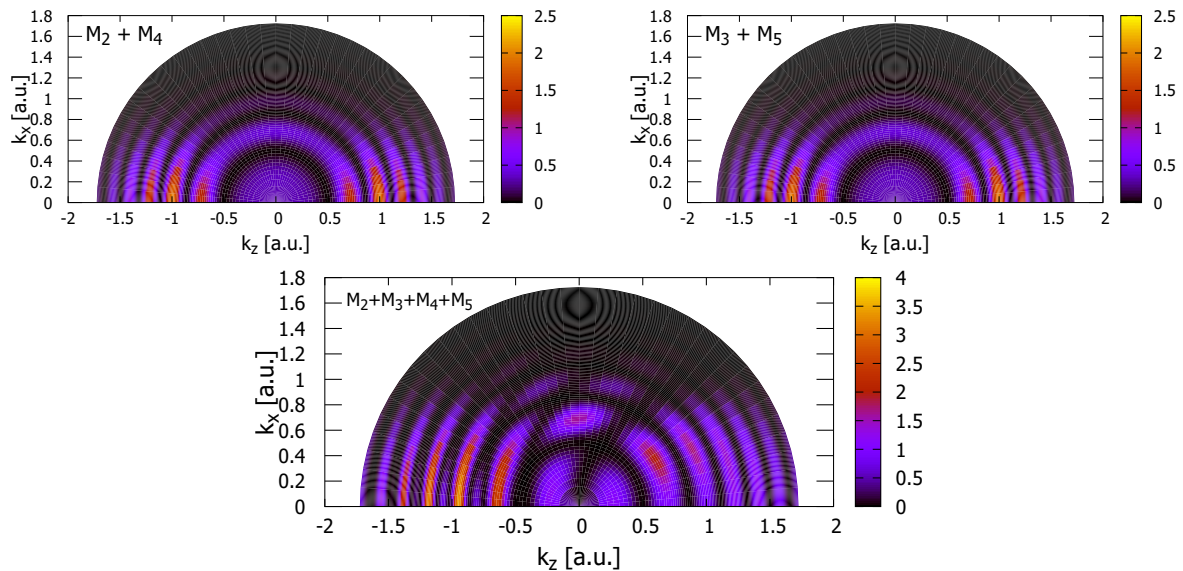
$$\delta = \frac{|M_i(\Delta t) - M_i(\frac{T}{4})|}{|M_i(\frac{T}{4})|} \cdot 100,$$

ahol $M_i(\frac{T}{4})$ a teljes félciklusra számított átmeneti valószínűségi amplitúdó értéke.



8. ábra. $\omega = 0.25 \text{ a.u.}$ - $E_0 = 0.25 \text{ a.u.}$ térparaméterek esetén δ függése a Δt -től.

Amint a 8. ábrán megfigyelhető, a δ értéke viszonylag gyorsan konvergál a 0-hoz. Ez azt jelenti, hogy a félciklusra számolt átmeneti valószínűségi amplitúdó nagyrészt megadható mint a félciklus maximuma körüli $2\Delta t$ szélességű, viszonylag keskeny időintervallum hozzájárulása. Ez úgy is magyarázható, hogy egy félciklus alatt keletkező szabadelektron-hullámcsomag nagy része az elektromos térerősség maximuma környékén jön létre.

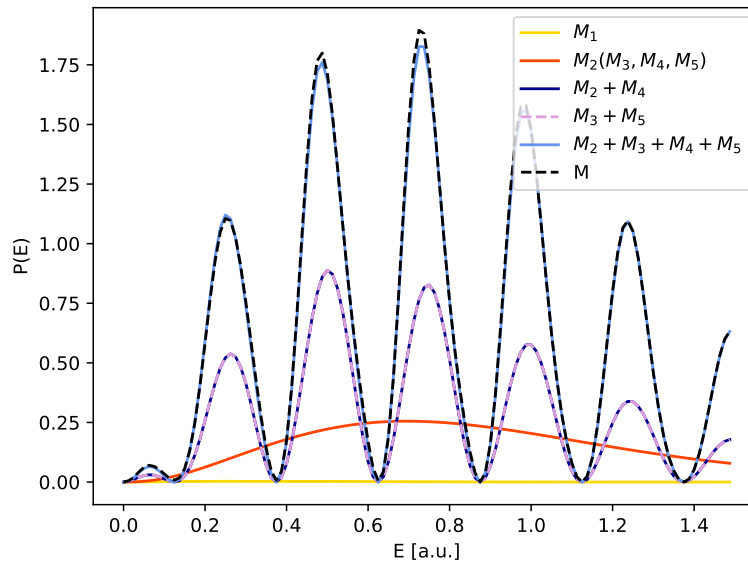


9. ábra. $\omega = 0.25 \text{ a.u.}$ - $E_0 = 0.25 \text{ a.u.}$ esetén sokfoton csúcsok és nodális síkok kialakulása a különböző félciklusokban keletkező elektronhullámcsomagok interferenciája során. Az egyes ábrákon jelölve van, hogy mely félciklusokhoz rendelhető átmeneti valószínűségi amplitudók koherens szuperpozíciójából alakultak.

A 9. ábra szemlélteti, hogy két azonos fázisú félciklusban (2. és 4. vagy 3. és 5.) keletkezett hullámcsomagok interferenciája teljesen szimmetrikus struktúrákhoz vezet, amelyek az ATI csúcsoknak megfelelő gyűrűkből állnak. Ezekben a gyűrűrendszerekben a nodális síkok, ahol az átmeneti valószínűségi amplitudó értéke nulla, az ellentétes fázisú lézerciklusokban keletkezett elektronhullámcsomagok egymásratevődése miatt alakulnak ki.

Minden paraméterpárra az adott félciklushoz tartozó elektronhullámcsomagok kettesével vett interferenciamintája azonos alakú, illetve a struktúrák kialakulásának mechanizmusa is hasonló, így elengedő egy paraméterpár vizsgálatára korlátozódni.

A sokfoton csúcsok kialakulása az elektron kilépési irány szerint integrált ionizációs valószínűség-sűrűségben is nyomon követhető, amint a 10. ábra is szemlélteti.



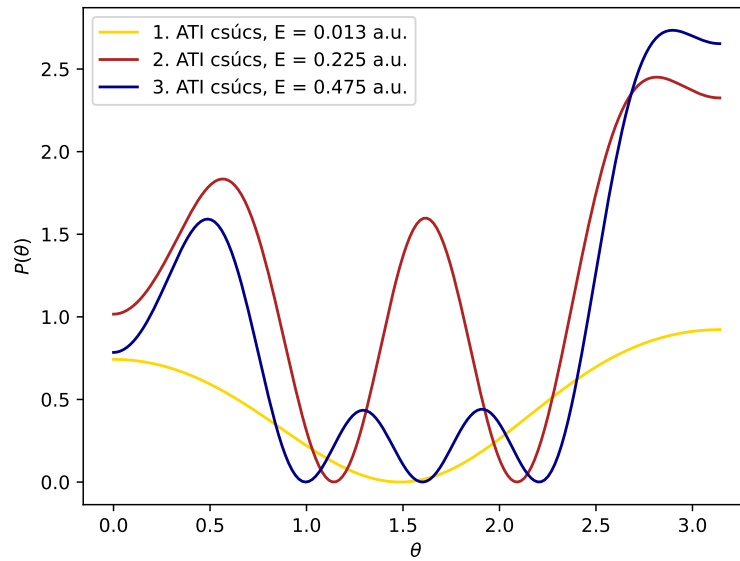
10. ábra. $\omega = 0.25 \text{ a.u.}$ - $E_0 = 0.25 \text{ a.u.}$. Egyes félciklusok hozzájárulása az ionizációs valószínűség-sűrűség értékéhez. M az összes félciklus hozzájárulását jelzi, a korrekciós kiegészítésekkel együtt.

Elsősorban kiemelendő, hogy a korrekciós félciklusok, M_1 és M_6 , hozzájárulásai elhanyagolhatóak a többihez képest, ezek valóban nem befolyásolják az eredmények végső kiértékelését. Továbbá a 2, 3, 4, 5 félciklusokban keletkezett hullámcsomagok, az ionizációs valószínűséghez való hozzájárulás szempontjából megegyeznek, amint a 7. ábrán feltüntetett ionizációs valószínűség értékek is igazolják.

Amint már tárgyaltuk, a 10. ábra is erősíti azt a következtetést, hogy az azonos fázisú hullámcsomagok, $M_2 + M_4$ vagy $M_3 + M_5$ hozzák létre az ATI csúcsokat.

4.4. Elektron-szögeloszlás az ATI gyűrűk mentén

Ábrázolva az ionizációs valószínűség-sűrűséget a kilépési szög függvényében, a $P(k)$ maximumainak megfelelő energiaértékekre adott térparaméterekre, megkapjuk az elektron-szögeloszlást az ATI gyűrűk mentén.



11. ábra. $\omega = 0.25 \text{ a.u.}$ - $E_0 = 0.25 \text{ a.u.}$ térparaméterek esetén az elektron-szögeloszlás az első három ATI gyűrű mentén.

A 11. ábra alapján minőségi jellemzést végezhetünk. Az ATI csúcsok fotonelnyelés eredményeképp jelennek meg, mindegyikhez eggyel nagyobb fotonszám befogása rendelhető, mint az előtte levő csúcshoz. A fotonelnyelés az impulzusnyomaték értékének megváltozásához vezet, vele együtt nő az l mellékvantumszám értéke és láthatóan a nodális síkok száma is.

Következtetések és továbbfejlesztési lehetőségek

Nagy intenzitású, alacsony frekvenciájú lézerimpulzus kölcsönhatását vizsgáltuk hidrogén atommal erős tér közelítésben, úgy a modellből kapott eredmények értelmezése, mint ezeknek az időfüggő Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásából kapott eredményekkel való összehasonlításuk által.

Az SFA modell eredményei azt mutatják, hogy lézer-atom kölcsönhatáskor minden lézerfélciklusban, a térerősség modulusának maximális értéke környékén keletkezik egy elektronhullámcsomag. Ezekhez komplex valószínűségi amplitudók rendelhetők, amelyek koherens egymástratevődése interferenciát eredményez. Az egymással fázisban levő félciklusokban keletkezett hullámcsomagok interferenciája vezet az ATI csúcsok kialakulásához, amelyek az elnyelt fotonenergiának megfelelő távolságra helyezkednek el egymástól, illetve amelyek helyzete kiszámítható az atom ionizációs potenciáljának és a térparaméterek ismeretében. Az egymással ellenfázisban levő hullámcsomagok interferenciája a nodális síkok megjelenését eredményezi. Ábrázolva az elektron-szögeloszlást az ATI csúcsok mentén, szemléltethető amint a fotonelnyeléssel nő az impulzusnyomaték értéke és ekképp a nodális síkok száma.

Összehasonlítva modellünket az időfüggő Schrödinger-egyenlet egzakt megoldásának eredményeivel, eltéréseket fedezünk fel, amelyek abból származnak, hogy az SFA elhanyagolja a Coulomb-kölcsönhatást ionizáció után, így kimarad belőle az elektron újrabefogás és újraszóródás. Ekképp a kétszeresen differenciális ionizációs valószínűségek összehasonlításánál a TDSE esetében új, összetettebb struktúrák jelennek meg és az ATI spektrumok alakja megváltozik.

A jövőben az SFA modellt magasabb rendű közelítésre szeretnénk kiterjeszteni, amellyel a direkt elektronok mellett az újraszóródást, újrabefogást szenvedett elektronokat is tanulmányozni lehessen. Ezáltal pontosíthatjuk modellünket, közelebb kerülve az egzakt megoldások által szolgáltatott eredményekhez.

Hivatkozások

- [1] C. Joachain, N. Kylstra és R. Potvliege. *Atoms in Intense Laser Fields*. Cambridge University Press, 2012.
- [2] S. Borbély és mások. „Spatial and temporal interference during the ionization of H by few-cycle XUV laser pulses”. *Phys. Rev. A* 87 (2013).
- [3] Xue-Bin Bian és mások. „Subcycle interference dynamics of time-resolved photoelectron holography with midinfrared laser pulses”. *Phys. Rev. A* 84 (2011).
- [4] Y. Huismans és mások. „Time-Resolved Holography with Photoelectrons”. *Science* 331 (2010), 61–64. oldal.
- [5] S. Borbély és mások. „Photoelectron holography of atomic targets”. *Phys. Rev. A* 99 (2019).
- [6] Tsendsuren Khurelbaatar és mások. „Strong-field photoelectron holography in the subcycle limit”. *Light: Science and Applications* (2024).
- [7] C. Figueira de Morisson Faria és A. S. Mawell. „It is all about phases: ultrafast holographic photoelectron imaging”. *Rep. Prog. Phys.* 83 (2020).
- [8] L. V. Keldysh. „Ionization in the Field of a Strong Electromagnetic Wave”. *Soviet Physics JETP* 20 (1965).
- [9] W. Becker et al. „Above-Threshold Ionization: From Classical Features to Quantum Effects”. *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics* 48 (2002), 36–98. oldal.
- [10] R. Mehrem. „The plane wave expansion, infinite integrals and identities involving spherical Bessel functions”. *Applied Mathematics and Computation* 217.12 (2011), 5360–5365. oldal.
- [11] NIST. *Chapter 34 3j,6j,9j Symbols*. URL: <https://dlmf.nist.gov/34.3> (elérés dátuma: 2024. máj. 4.)
- [12] K. Lin et al. „Photoelectron energy peaks shift against the radiation pressure in strong-field ionization”. *Science Advances* 8 (2022).

DECLARAȚIE PE PROPRIE RĂSPUNDERE

Subsemnatul, Joós Krisztina, declar că Lucrarea de licență pe care o voi prezenta în cadrul examenului de finalizare a studiilor la Facultatea de Fizică, din cadrul Universității Babeș-Bolyai, în sesiunea iulie 2024 , sub îndrumarea Lect. dr. Borbély Sándor, reprezintă o operă personală. Menționez că nu am plagiat o altă lucrare publicată, prezentată public sau un fișier postat pe Internet. Pentru realizarea lucrării am folosit exclusiv bibliografia prezentată și nu am ascuns nici o altă sursă bibliografică sau fișier electronic pe care să le fi folosit la redactarea lucrării.

Prezenta declarație este parte a lucrării și se anexează la aceasta.

Data,

Nume,

Semnătură