

Intenzív lézerimpulzussal kölcsönható atomi és szabad elektronok dinamikája és sugárzása

Doktori (Ph.D.) értekezés

Hack Szabolcs

Témavezetők:

Dr. Czirják Attila

tudományos munkatárs, c. egyetemi docens

Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Fizikai Tanszék

ELI-ALPS, Szeged

Prof. Dr. Varró Sándor

tudományos tanácsadó, egyetemi magántanár

Wigner Fizikai Kutatóintézet, Budapest

ELI-ALPS, Szeged



SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM

FIZIKA DOKTORI ISKOLA

TERMÉSZETTUDOMÁNYI ÉS INFORMATIKAI KAR

ELMÉLETI FIZIKAI TANSZÉK

Szeged

2021

Tartalomjegyzék

Bevezetés	1
I. Elméleti alapok	4
1. A fény-anyag kölcsönhatás elméleti modelljei	5
1.1. Klasszikus anyag, klasszikus fény	6
1.1.1. A klasszikus elektrodinamika alapjai	6
1.1.2. Ponttöltés sugárzási tere	7
1.1.3. Klasszikus trajektória számításokon alapuló numerikus mód- szerek	9
1.2. Kvantumos anyag, klasszikus fény: a szemi-klasszikus leírás	11
1.2.1. Az elektromágneses mező és a hullámfüggvény mértéktransz- formációja	11
1.2.2. Időfüggő perturbációs számítás	14
1.2.3. Nem-perturbatív elméleti modellek	14
1.2.4. Wigner-függvény	16
1.3. Kvantumos anyag, kvantált fény: kvantumoptika, kvantum - elekt- rodinamika	19
1.3.1. Kvantált elektromágneses mező és a foton	19
1.3.2. A mező nevezetes állapotai	21
II. Új tudományos eredmények	23
2. Relativisztikus Thomson-szórás	24
2.1. Bevezetés és irodalmi áttekintés	24
2.2. Célkitűzések	26
2.3. A mozgásegyenlet és megoldása	27
2.3.1. A mozgásegyenlet visszavezetése kvadratúrára	27
2.3.2. Megoldás szinusznégyszet burkolójú lézerimpulzus esetén . .	29
2.3.3. Kezdeti érték probléma tárgyalása	30

2.4.	Kisugárzott mező spektrális eloszlása és időbeli alakja	32
2.4.1.	Egyetlen elektron által kisugárzott mező	32
2.4.2.	Ideális elektroncsomag tárgyalása; a koherencia tényező	35
2.4.3.	Elektron nano-csomag sugárzási tere	38
2.5.	Az attoszekundumos fényimpulzus tulajdonságai	41
2.5.1.	A vivő-burkoló fáziskülönbség kontrollálhatósága	41
2.5.2.	A bejövő lézerimpulzus intenzitásának hatása	42
2.5.3.	Fázismodulált szóródó lézerimpulzus esete	44
2.6.	A fejezetben bemutatott eredmények összefoglalása	46
3.	Erős-teres ionizáció a fázistéren	49
3.1.	Bevezetés és irodalmi áttekintés	49
3.2.	Célkitűzések	57
3.3.	Az erős-teres ionizáció kvantumdinamikája	57
3.3.1.	A Schrödinger-egyenlet numerikus megoldása	57
3.3.2.	Az elektron Wigner-függvénye	59
3.3.3.	A kvantummomentum függvény és a hullámfüggvény kapcsolata	60
3.3.4.	Az erős-teres ionizáció kvantumdinamikájának tulajdonságai	63
3.4.	Az erős-teres ionizáció klasszikus dinamikája	67
3.4.1.	A klasszikus mozgásegyenlet és megoldása	67
3.4.2.	A klasszikus trajektóriák kezdeti értékei	68
3.4.3.	A kezdeti időpillanat hatása a klasszikus dinamikára	71
3.5.	A direkt ionizáció dinamikája és a kezdeti időpillanat rekonstrukciója	73
3.5.1.	Az ionizálódott hullámcsomag előállítás	73
3.5.2.	A pozitív energiás és pozitív impulzusú hullámcsomag Wigner-függvénye és a klasszikus trajektóriák	74
3.5.3.	A kezdeti időpillanat meghatározása az elektron detektoron mért impulzusából	75
3.6.	A fejezetben bemutatott eredmények összefoglalása	79
	Összefoglalás és tézisek	82
	Summary of the thesis	88
	Köszönetnyilvánítás	94
	Publikációk	95
	Irodalomjegyzék	98

Bevezetés

A fény-anyag kölcsönhatás kutatása, az elmúlt fél évszázad tapasztalatai alapján, egyrészt a fizika szempontjából is egyre inkább kulcsfontosságú, másrészt az új eredmények egyre gyorsabban fejlődnek olyan technológiákká, amelyek más tudományterületeknek új vizsgálati módszereket adnak, különféle kézenfekvő vagy akár váratlan technikai alkalmazásokra találnak, esetenként új iparágat teremtenek. Ezt a tudományos-technikai diadalmenetet a lézer megalkotása [1] indította útjára, és minden évtizedre jutottak Nobel-díjjal elismert újabb áttörő eredmények, újabb távlatokat nyitva. Az egyik legfontosabb fejlődés irány az egyre rövidebb időtartamú és (részben ennek köszönhetően) egyre nagyobb intenzitású lézerimpulzusok létrehozása és alkalmazása, melyek lehetővé teszik a fény-anyag kölcsönhatás vizsgálatát az egyre erősebben nemlineáris tartományban. Ez a kutatási terület szép példája annak is, ahogy a kísérleti és az elméleti kutatómunka egymást segítve halad előre, és mára eljutott például az atomi időskálán lejátszódó bonyolult kvantumfizikai folyamatok pontos kísérleti vizsgálatának lehetőségéhez és mély elméleti megértéséhez.

A lézertechnológia fejlődésével, ahogyan képesek lettünk egyre rövidebb lézerimpulzusokat előállítani, egyre rövidebb atomi és molekuláris folyamatok dinamikáját tudtuk *in situ* vizsgálni [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8]. Hasonlóan ahhoz, ahogyan a fényképészetben a vaku felvillanásának időtartama és az objektív zárideje meghatározza, hogy milyen gyors mozgásról tudunk éles képet készíteni, úgy például egy molekula disszociációjának vagy éppen forgásához időbeli vizsgálatához, mivel annak karakterisztikus időskálája pikoszekundum, ebbe a nagyságrendbe eső impulzushosszúságú lézerimpulzusra van szükségünk. Természetesen, ha ennél rövidebb időtartam alatt végbemenő folyamatot szeretnénk megfigyelni, akár molekulák vibrációs dinamikáját vagy a nívói között femtoszekundum alatt lejátszódó elektron átmenetet, akkor még rövidebb, fs-os lézerimpulzust használunk. Ultragyors folyamatnak éppen ezért mindig az adott csúcstechnológiával éppen még vizsgálható vagy ennél gyorsabban lejátszódó folyamatot tekintjük. Lézerberendezésből még fázismodulált (vagy az angol chirped szó alapján csörpölt) impulzusú erősítés esetén [9] sem tudunk femtoszekundumnál rövidebb lézerimpulzust előállítani. Azonban az atomokban, molekulákban lejátszódó, elektronok

dinamikájához kötött, legelemibb folyamatok karakterisztikus időskálája az attoszekundum (as, 10^{-18} s) nagyságrendjébe esik.

Mint tudjuk, az elektronok játszották a főszerepet a 20. század tudományos és technikai fejlődésében [10], és úgy tűnik, hogy ilyen értelemben vett hegemoniájuk töretlen marad legalább a 21. század első felében. Éppen ezért fundamentális jelentőségű, hogy elméleti és kísérleti módszerekkel feltérképezzük ennek a mikrokozmosznak egyre újabb területeit is, amelyet összefoglaló néven attoszekundumos fizikának nevezünk. Ezen a területen jelenleg a csúcstechnológiát jelentő mérési eljárások legtöbbször az ún. pumpa-próba módszert követik [2]. Megfelelő tulajdonságú lézerimpulzussal nemesgázatomokon magasrendű harmonikus-keltés révén extrém ultraibolya sugárzást keltenek, amely megfelelő kísérleti körülmények között makroszkopikus szinten is detektálható ultrarövid, attoszekundum nagyságrendjébe eső impulzushosszúságú fényimpulzussá szuperponálódik. Ezután a keltő lézerimpulzust és a másodlagos sugárforrásból származó fényimpulzust rávezetve a megfelelően preparált, vizsgálandó céltárgyra, lövésről-lövésre változtatva közöttük az időkésléptetést, dinamikai információt nyerhetünk a céltárgyban a pumpa impulzus hatására lejátszódó folyamatokról [11]. Ez a technológia is rengeteget finomodott az elmúlt évtizedben, azonban a magasharmonikus-keltés fizikája miatt megvannak a maga korlátai.

Kísérleti oldalról, mivel napjainkig az attoszekundumos fényimpulzusok előállítására leggyakrabban a fent említett módon, nemesgáz atomokon történik, a létrejövő attoszekundumos fényimpulzus nem lehet egy bizonyos, a kölcsönhatás fizikai törvényei által behatárolt intenzitásnál nagyobb intenzitású. Ennek egészen egyszerűen az az oka, hogy a keltő, általában infravörös lézerimpulzus sem lehet akármilyen intenzív, hiszen ekkor ionizálná a nemesgázt, és nem jönne létre magasrendű felharmonikus-keltés. Hasonló fizikai okok miatt ezzel az eljárással a másodlagos sugárzásként előálló, széles spektrumú, attoszekundumos fényimpulzus nem tartalmazhat egy bizonyos határhullámhossznál rövidebb hullámhosszú komponenseket. Azonban számos fizikai folyamat szempontjából, melyet szükséges lenne kísérletileg tanulmányozni, elengedhetetlen az eddigieknél intenzívebb vagy szélesebb spektrális tartományba eső attoszekundumos fényimpulzus használata. Ezért a dolgozatban elméleti megfontolásokra és szimulációkra alapozva bemutatunk egy alternatív attoszekundumos fényimpulzus keltési javaslatot, amely relativisztikus Thomson-szóráson alapul.

Elméleti oldalról azok a modellek, amelyek leírják, hogyan is történik atomi szinten a magasrendű harmonikus-keltés, bár a kísérletekkel többé-kevésbé meg-egyező jóslatokat tesznek, egy sor kísérletileg még nem kellően ellenőrzött, vagy akár ellenőrizhetetlen feltevésen alapszanak. Ezekben a modellekben az a közös, hogy a magasharmonikus-keltés összetett folyamatán belül az első részfolyamat

az atomi potenciálban kötött elektron valamilyen effektussal, általában optikai algaúteffektussal, történő ionizációja. Ez az effektus önmagában is egzotikus kvantumjelenségnek tekinthető, amelynek bizonyos körülményei, főként időfüggő esetben, mai napig tisztázatlanok. Ebben a témakörben olyan kérdésekre keressük a választ, mint hogy az erős lézertérben lejátszódó ionizáció kvantumdinamikáját miként lehet szemléletesen leírni, hogyan tudjuk a fázistéren reprezentálni az ionizált hullámcsomagot, milyen klasszikus fizikai modell írja le a folyamatot a legpontosabban, és mérhető mennyiségekből mit tudunk mondani a klasszikus mozgás kezdeti feltételeiről.

Az értekezés az alábbi módon épül fel. Az I. részben áttekintjük a legfontosabb elméleti modelleket, amelyek a fény-anyag kölcsönhatás leírására szolgálnak, különös tekintettel azon modellekre, amelyekre a későbbiekben alapozunk. Ezután a II. részben rátérünk az új eredmények ismertetésére. A 2. fejezetben egy rövid, szorosan a témához kapcsolódó bevezető és irodalmi áttekintő után bemutatjuk a relativisztikus Thomson-szórással mint perspektivikus attoszekundumos fényimpulzus forrással kapcsolatos eredményeinket. A 3. fejezetben az elengedhetetlen mélységű szakirodalmi áttekintés után az erős lézertérben lejátszódó ionizációval kapcsolatos vizsgálataink eredményeit mutatjuk be. Az értekezést egy magyar és egy angol nyelvű összefoglaló zárja.

I. rész

Elméleti alapok

1. fejezet

A fény-anyag kölcsönhatás elméleti modelljei

A fény-anyag kölcsönhatás elméleti modelljeinek egyik és talán a legkézenfekvőbb csoportosítása azon alapszik, hogy az anyagot, illetve a fényt milyen elméleti modell keretein belül írjuk le. Tehát kezelhetjük az anyagot, legyen az elemi részecske, atom, molekula vagy szilárdtest, klasszikus vagy kvantummechanikai objektumként. Hasonlóan, a fényt is leírhatjuk a klasszikus fizikában használatos termennyiségekkel, \mathbf{E} elektromos mezővel, illetve \mathbf{B} mágneses mezővel, vagy, amennyiben a vizsgált probléma megkívánja, használhatjuk ezen termennyiségek kvantum-elektrodinamikai általánosítását, valamint az „igazi” foton képet. Teljesség kedvéért megjegyezzük, hogy a kvantummechanikai leírások mélységükben különböztetnek egymástól (v.ö. Schrödinger-egyenlet, valamint másod-kvantált formalizmus), azonban jelen csoportosításban csak a klasszikus, valamint a kvantum leírás között teszünk különbséget. Általában az is elmondható, hogy ahogy az egyre magasabb szintű elméleti leírások felé fordulunk, először az anyag leírásának modellje lép szintet, és utána követi a fény elméleti modelljének szofisztikáltabb tárgyalása. Gondoljunk csak példaként az ún. szemi-klasszikus leírásra, amellyel jelen értekezés 3. fejezete is részletesen foglalkozik, ahol az atomot, illetve az elektront kvantummechanikai objektumként kezeljük, azonban a feltételezett lézerteret a klasszikus termennyiségekkel jellemezzük. Ezzel szemben ritkán előforduló elméleti modell, hogy például egy klasszikus, pontszerűnek tekintett töltés kölcsönhasson egy másod-kvantált formalizmusban az értelmezett fotonnal.

Az értekezés ezen, bevezető fejezete tehát az imént tárgyalt csoportosítás alapján röviden sorra veszi az egyes elméleti modellek alapjait, különös figyelmet fordítva azokra, amelyeket a II. részben használunk.

1.1. Klasszikus anyag, klasszikus fény

Ebben a szakaszban a fény-anyag kölcsönhatás legegyszerűbb, de ugyanakkor napjainkban is meglepően jól használható elméleti modelljét tárgyaljuk. Természetesen nem célunk a témakört minden mélységében feldolgozni, ez lehetetlen vállalkozás is lenne ezen értekezés keretein belül, hiszen olyan kiváló, sok száz oldalas tankönyvek íródtak a témában, mint Jackson alapműnek számító Klasszikus Elektrodinamika című könyve [12], vagy Landau hasonlóan híres könyvsorozatának második kötete [13], csupán az alapvető gondolatokat, az elmélet vezérfonalát és a később használatos egyenleteket szándékozunk összefoglalni.

1.1.1. A klasszikus elektrodinamika alapjai

Egy m tömegű és q töltésű ponttöltés mozgását elektromágneses mezőben az alábbi Newton-egyenlet írja le.

$$\frac{d}{dt}\mathbf{p}(t) = q(\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v}(t) \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)), \quad (1.1.1)$$

ahol bal oldalt a ponttöltés $\mathbf{p}(t) = m\mathbf{v}$ impulzusvektorának idő szerinti deriváltja áll, jobb oldalon pedig az elektromágneses mező által kifejtett Lorentz-erő, amelyben $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ az elektromos térerősségvektor, $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ a mágneses indukcióvektor és $\mathbf{v}(t) = \dot{\mathbf{r}}(t)$ a ponttöltés sebességvektora. Mint tudjuk, a fenti egyenlet csupán a kölcsönhatás egyik fele, amellyel meghatározható, hogyan mozog egy ponttöltés adott elektromágneses mezőben, azonban azt, hogy az adott töltés-, valamint árameloszlás hogyan kelti az elektromágneses mezőt, a Maxwell-Lorentz egyenletek mondják meg.

$$\nabla \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\varepsilon_0} \rho(\mathbf{r}, t), \quad (1.1.2a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \dot{\mathbf{B}}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (1.1.2b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (1.1.2c)$$

$$\nabla \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) - \varepsilon_0 \mu_0 \dot{\mathbf{E}}(\mathbf{r}, t) = \mu_0 \mathbf{J}(\mathbf{r}, t), \quad (1.1.2d)$$

ahol $\rho(\mathbf{r}, t)$ a töltéssűrűség, ε_0 a vákuum dielektromos állandója, μ_0 a vákuum permeabilitása, $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ pedig az áramsűrűség vektor. Tehát a (1.1.1) Newton-egyenlet meghatározza, hogyan mozog a töltés adott \mathbf{E} és \mathbf{B} vektorokkal jellemzett mezőben, míg a (1.1.2a)-(1.1.2d) Maxwell-Lorentz egyenletek megmondják, hogy a töltések hogyan keltik a mezőt. Azonban igen gyakran előfordul, hogy a kölcsönhatást csak az egyik oldalról vizsgáljuk, és a másik oldalról „elfeledkezünk”. Például, ha egy ponttöltés mozgását intenzív elektromágneses mezőben

szeretnénk vizsgálni, akkor a töltés mozgása során kisugárzott mező visszahatását az azt létrehozó töltésre általában elhanyagoljuk, annak gyenge volta miatt.

Amennyiben az (1.1.1) egyenletben a $\mathbf{p}(t)$ impulzusvektor alatt a relativisztikus impulzust értjük, azaz

$$\mathbf{p}(t) = \gamma(t) m \mathbf{v}(t), \quad (1.1.3)$$

ahol

$$\gamma(t) = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v(t)^2}{c^2}}}, \quad (1.1.4)$$

a Lorentz-faktor, amelyben c a fénysebesség, akkor az egyenlet fennáll akkor is, amikor a ponttöltés nagyon nagy, a fénysebességhez közeli sebességre tesz szert, azaz a speciális relativitáselmélet keretein belül. Ekkor persze az (1.1.1) egyenlet jobb oldalán a laboratóriumi koordináta-rendszerben mérhető és megfigyelhető terményiségek ($\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ és $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$) szerepelnek. Felhasználva a labor-rendszerbeli idő (t) és a ponttöltés saját-rendszeréhez rendelt ún. sajátidő (τ) kapcsolatát,

$$\frac{dt}{d\tau} = \gamma(t), \quad (1.1.5)$$

az(1.1.1) egyenlet egyszerűen átírható a Mikowski-féle négydimenziós téridőben használatos négyes írásmódra. Ekkor az egyenlet az alábbi alakot ölti,

$$m \frac{d\mathbf{u}}{d\tau} = \frac{e}{c} [u^0 \mathbf{E} + \mathbf{u} \times \mathbf{B}], \quad (1.1.6)$$

ahol \mathbf{u} a ponttöltés helyzetét a Minkowski-térben leíró négydimenziós helyvektor ($\underline{\mathbf{x}} = \{ct, \mathbf{r}\}$) térszerű komponensének sajátidő szerinti deriváltja,

$$\underline{\mathbf{u}} = \{u^0, \mathbf{u}\} = \left\{ \frac{dx^0}{d\tau}, \frac{d\mathbf{r}}{d\tau} \right\} = \left\{ \frac{d(ct)}{d\tau}, \gamma \mathbf{v} \right\} = \{\gamma c, \gamma \mathbf{v}\}. \quad (1.1.7)$$

Ezek alapján az időszerű komponensre vonatkozó a dinamikai egyenletet, azaz az elektromágneses mező munkatételét a következő alakban írhatjuk fel,

$$m \frac{du^0}{d\tau} = \frac{e}{c} \mathbf{u} \cdot \mathbf{E}. \quad (1.1.8)$$

1.1.2. Ponttöltés sugárzási tere

Korábban említettük, hogy a ponttöltés által kisugárzott mezőt nem feltétlenül vesszük figyelembe az önmagára történő visszahatás során, azonban ezek sok fizikai szituációban érdekes tulajdonságokkal bíró elektromágneses mezők lehetnek. Az analízishez persze elméleti szempontból ki kell tudnunk számolni a tetsző-

legesen mozgó ponttöltés által kisugárzott mezőt, amit a Liénard-Wiechert-féle potenciálok alapuló képlettel tehetünk meg.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta}}{\gamma^2 (1 - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n})^3 R^2} \right]_{\text{ret}} + \frac{q}{4\pi\epsilon_0 c} \left[\frac{\mathbf{n} \times \{(\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta}) \times \dot{\boldsymbol{\beta}}\}}{(1 - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n})^3 R} \right]_{\text{ret}} \quad (1.1.9a)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c} \mathbf{n} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t), \quad (1.1.9b)$$

ahol $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$ a ponttöltéstől a megfigyelési pontba mutató egységvektor, $R = |\mathbf{R}|$ a ponttöltéstől a megfigyelési pontba mutató vektor hossza, és $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{v}/c$, valamint $\dot{\boldsymbol{\beta}} = \dot{\mathbf{v}}/c$ rendre a fénysebességgel normált sebesség, illetve gyorsulás. A zárójeleknél szereplő „ret” kifejezés arra utal, hogy ezeket a kifejezéseket a kausalitást figyelembe véve a t időpillanatnál korábbi $t_{\text{ret}} = t - R(t)/c$ retardált időben kell kiértékelni. Az (1.1.9a) kifejezés első tagja az ún. „sebességi” tag, a második az ún. „gyorsulási” tag. A sebességi tag, ahogyan a neve is mutatja, független a gyorsulástól, illetve a ponttöltés és a megfigyelési pont távolságának négyzetével fordítottan arányos. Ebből adódóan ez a tag írja le a közeli mezőket, valamint akkor igazán lényeges, amikor a ponttöltés gyorsulása nulla, tehát van olyan inerciarendszer, amelyben a ponttöltés nyugalomban van. Ezzel szemben a gyorsulási tag a töltéstől mért távolság első hatványával fordítottan arányos, így a töltéstől nagy távolságokra ez adja a lényeges járulékot a kisugárzott elektromágneses mezőhöz. Ha elvégezzük az (1.1.9a) egyenlet második, azaz „gyorsulási” tagjának Fourier-transzformációját a kölcsönhatási tartomány méretéhez képest nagy távolságokban a kisugárzott tér spektrális eloszlását kapjuk eredményül.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 c} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\mathbf{n} \times \{(\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta}) \times \dot{\boldsymbol{\beta}}\}}{(1 - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n})^3 R} \right]_{\text{ret}} e^{i\omega t} dt \quad (1.1.10)$$

Amennyiben behelyettesítjük a $t_{\text{ret}} = t - R(t)/c$ egyenletet, valamint kihasználjuk, hogy a megfigyelési pont a kölcsönhatási tartománytól nagyon messze helyezkedik el, a kifejezés az alábbi alakot ölti.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 c} \frac{e^{i\frac{\omega}{c} R_0}}{R_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathbf{n} \times \{(\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta}) \times \dot{\boldsymbol{\beta}}\}}{(1 - \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{n})^2} e^{i\omega(t - \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}}{c})} dt, \quad (1.1.11)$$

ahol R_0 a megfigyelési pont távolsága. Tehát ismerve a ponttöltés (1.1.1) egyenlet által meghatározott trajektóriáját a kisugárzott mező spektrális eloszlása meghatározható. Megjegyezzük, hogy bár eddig csupán ponttöltés vákuumban lejátszódó elektrodinamikájával foglalkoztunk, a fenti gondolatok kis általánosítással,

átlagolási eljárásokkal közegek elektrodinamikájának leírására is alkalmasak.

1.1.3. Klasszikus trajektória számításokon alapuló numerikus módszerek

Ahogy a szakasz elején szó volt róla, bár az itt tárgyaltak a fény-anyag kölcsönhatás egyszerű modelljének tűnhet, napjainkig szerves részét képezik az aktív kutatói munkamódszereknek. Azáltal, hogy a klasszikus modellben tárgyalt problémák igen sokszor alacsony rendű, közönséges- vagy parciális differenciálegyenletek megoldásához vezetnek, a számítógépes erőforrásigényük jóval kisebb, mint egy ugyanazt a problémát tárgyaló szemi-klasszikus vagy kvantumoptikai, kvantum-elektrodinamikai modellnek. Természetesen a tisztán kvantummechanikai jelenségek, mint például az interferencia, nem jelennek meg a klasszikus modellben történő számítások során, azonban számos esetben ez nem okoz jelentős információvesztést, főleg annak tükrében, hogy mennyit nyerhetünk a kevesebb számítási erőforrásigény miatt.

Példaként két, manapság gyakran használt módszert említünk. Az első az ún. klasszikus trajektórián alapuló Monte-Carlo szimuláció, a második pedig az ún. „részcseke a cellában” módszer. Az előbbit a szakirodalomban CTMC modellnek nevezik a „classical trajectory Monte-Carlo model” angol kifejezés alapján, az utóbbit pedig PIC szimulációnak a „particle-in-cell” ugyancsak angol kifejezés kezdőbetűiből alkotott betűszó szerint.

A klasszikus trajektóriákat használó Monte-Carlo szimulációk azon alapulnak, hogy véletlenszerűen választott teszt részecskék, amelyek imitálják a vizsgált kvantumrendszer kezdeti fázistér eloszlását, az (1.1.1) klasszikus mozgásegyenlet szerint (ha nyitott rendszerről van szó akkor a Langevin-egyenlet szerint) kölcsönhatnak az elektromágneses térrel, és ha elég jól választottuk meg a teszt részecskék mintavételezését, akkor a trajektóriák végpontjai jó közelítéssel visszaadják a kvantumrendszer ugyanezen kölcsönhatás utáni fázistér eloszlását. Mint említettük a módszer előnye az, hogy bonyolult kvantumrendszer Schrödinger-egyenlete helyett, a numerikusan sokkal egyszerűbben kezelhető (1.1.1) egyenletet kell csupán több kezdeti feltétel esetén megoldani. A módszerben rejlő lehetőségeket jól mutatja, hogy már 1966-ban használták hidrogén atom és proton kölcsönhatásának leírására [14, 15]. Az azóta eltelt időben alkalmazták, a teljesség igénye nélkül, belső szerkezettel rendelkező részecskék, atomok, molekulák ütközésének leírására [16], többatomos molekulák, biomolekulák belsődinamikájának tanulmányozására [17, 18, 19], valamint, jelen dolgozathoz leginkább kapcsolódó, kvantumrendszer erős lézertérben lejátszódó ionizációjának szimulációjára [20].

A másik, korábban említett, manapság gyakran használt klasszikus fény-anyag

kölcsönhatási modellt használó módszer a PIC szimuláció [21, 22, 23]. Ennek a numerikus eljárásnak az az alapja, hogy a töltött részecskék egy diszkrétizált rácson mozoghatnak, amelyeket cellaként reprezentálunk, innen az elnevezés. A töltések és az elektromágneses mező dinamikáját úgy szimuláljuk, hogy egy időlépésben megoldjuk az (1.1.1) egyenletet. Ezután a rácspontokban kiértékeljük a töltés és áramsűrűségeket, tehát az elektromágneses mező forrásait, a mozgásegyenlet alapján számolt új koordináta- és impulzuskomponenseket felhasználva, majd időben fejlesztjük az (1.1.2a)-(1.1.2d) Maxwell-Lorentz egyenletek alapján. A rácspontokon így megkapott térmennyiségekből különböző interpolációs technikákkal kiszámoljuk a cella belsejében, a részecske helyén a mezőt jellemző mennyiségek értékeit, és következik az újabb időlépés a klasszikus mozgásegyenlet megoldásával. Mivel a részecskék csak közvetve, a rácspontokon kiértékelt térmennyiségeken keresztül hatnak kölcsön, ezért ez az eljárás nem alkalmazható néhány-részecske rendszer esetén. Olyan rendszerek esetén hatékony, ahol a kollektív effektusok dominánsak, és a mikroszkopikusan átlagolt mezők jól leírják a részecskék dinamikáját. Az ilyen típusú szimulációkat a fény-anyag kölcsönhatás keretein belül leginkább plazmafizikai problémák elméleti modellezésére használjuk, mivel a számítási igény szempontjából viszonylag gazdaságosan egyszerre sok részecske leírható vele, olyan módon, hogy egy térbeli pontban lévő részecskét ún. makrorészecskének tekintünk. Ez azt jelenti, hogy egy ilyen makrorészecske nagyságrendben 10^3 valódi részecskét tartalmaz egyetlen térbeli pontba sűrítve. A módszer hátrányai között szerepel, hogy a makrorészecskék használatából adódóan statisztikus eljárás, azaz sok, több száz futtatási eredmény szükséges ahhoz, hogy megfelelő statisztikát lehessen készíteni belőle, azonban a makrorészecske szám optimalizálásával a futtatások száma redukálható. Továbbá a szimulálni kívánt fizikai probléma meghatározza a térszerű felbontás finomságát, ugyanis minél nagyobb a szimulálni kívánt plazma sűrűsége annál több rácspontra van szükség, hogy olyan finom effektusok, mint a rövid hullámhosszú oszcillációk a plazmában helyesen legyenek modellezve. Napjainkban rengeteg különböző PIC kód van használatban, azonban a felhasználónak azt is szem előtt kell tartani, hogy ezek a numerikus eljárások nem feltétlenül teljesítik az alapvető megmaradási törvényeket, sokszor sértik az impulzus- vagy az energiamegmaradást. Persze ettől függetlenül jól használhatók bizonyos fizikai problémák modellezésére, amikor a megmaradási tételek sérülése elhanyagolható mértékben befolyásolja a számítás és az ebből származó fizikai konklúzió eredményét. Például sikerrel alkalmazták lézeres plazmagyorsítás kísérleti eredményeinek elméleti leírására, fizikai értelmezésére [24, 25].

1.2. Kvantumos anyag, klasszikus fény: a szemi-klasszikus leírás

Az előző szakaszban tárgyalt modellnél kifinomultabb módszer a fény-anyag kölcsönhatás ún. szemi-klasszikus vagy fél-klasszikus leírása [26, 27]. Ezt az elméleti modellt akkor alkalmazzuk, ha a vizsgálni kívánt elemi részecske, atom, molekula esetleg szilárdtest kvantumos tulajdonságaira vagyunk kíváncsiak, azonban a kísérlet során használt lézertér olyan intenzív, hogy kezelhető az előző szakaszban tárgyalt klasszikus elektrodinamika keretein belül. Ez a feltevés a manapság használt, korszerű lézertechnológiák esetén fennáll, hiszen pikoszekundumnál rövidebb és 10^{13} W/cm²-nél nagyobb intenzitású lézerimpulzus előállítása ma már laboratóriumi rutinnak tekinthető. Ezekben a lézerimpulzusokban a fotonfluxus

$$\phi = \frac{I}{\hbar\omega}, \quad (1.2.1)$$

ahol I a lézerimpulzus intenzitása, \hbar a redukált Planck-állandó, ω a lézerimpulzus központi frekvenciája, olyan nagy, hogy szükségtelen a mező kvantumos jellegét is figyelembe venni a kölcsönhatás leírása során.

1.2.1. Az elektromágneses mező és a hullámfüggvény mértéktranszformációja

Az egyszerűség kedvéért tekintsük most egyetlen aktív, e töltésű és m tömegű elektronnal rendelkező atom és klasszikus elektromágneses mező kölcsönhatását. Mint tudjuk az elektron dinamikáját az időfüggő Schrödinger-egyenlet írja le.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H} |\Psi(t)\rangle, \quad (1.2.2)$$

ahol $|\Psi(t)\rangle$ a Hilbert-téren az elektron állapotát jellemző állapotvektor, \hat{H} pedig a vizsgált fizikai rendszer Hamilton-operátora. A fent tárgyalt esetben a Hamilton-operátor alakja az alábbi.

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{P}} - e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{R}}, t) \right)^2 + eU(\hat{\mathbf{R}}, t), \quad (1.2.3)$$

ahol $\hat{\mathbf{R}}$ és $\hat{\mathbf{P}}$ az elektron koordináta és impulzus operátora, $\mathbf{A}(\hat{\mathbf{R}}, t)$ és $U(\hat{\mathbf{R}}, t)$ az elektromágneses mező vektor- és skalárpotenciálja, amelyek a koordináta operátor, valamint az idő függvényei, tehát szintén operátorok. Megjegyezzük, hogy a vektor- és skalárpotenciál létezése az (1.1.2a)-(1.1.2d) Maxwell-Lorentz egyenletek következménye, miszerint a térmennyiségek egyértelműen meghatározhatók

a potenciálok segítségével.

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \nabla U(\mathbf{r}, t), \quad (1.2.4)$$

és

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t). \quad (1.2.5)$$

Továbbá tudjuk azt is, hogy adott elektromágneses mezőt végtelen sok különböző vektorpotenciál-skalárpotenciál pár ír le, azaz az elektromágneses mező rendelkezik az alábbi mértékszabadsággal,

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \nabla \chi(\mathbf{r}, t), \quad (1.2.6a)$$

és

$$U'(\mathbf{r}, t) = U(\mathbf{r}, t) - \frac{\partial}{\partial t}\chi(\mathbf{r}, t), \quad (1.2.6b)$$

ahol $\chi(\mathbf{r}, t)$ tetszőleges skalár értékű függvény. Ez a mértékszabadság hozzásegít minket ahhoz, hogy a fizikai problémát a hozzá leginkább illeszkedő mértékválasztás szerint tárgyaljuk. A fény-anyag kölcsönhatás szemi-klasszikus leírásánál ez az ún. Coulomb-mérték, amit az alábbi módon definiálunk,

$$\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (1.2.7)$$

Ez a feltétel természetesen nem invariáns a Lorentz-transzformációra nézve, azonban nem relativisztikus atomfizikai problémák esetén számos előnye van. Például ekkor az $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ vektorpotenciál felcserélhető a $\hat{\mathbf{P}}$ impulzus operátorral, valamint az atommag statikus elektromos mezője és a külső elektromágneses mező szeparálható, ami a Hamilton-operátor alábbi alakjához vezet.

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} - \frac{e}{m}\hat{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{A}(\hat{\mathbf{R}}, t) + \frac{e^2}{2m}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{R}}, t)^2 + eU(\hat{\mathbf{R}}), \quad (1.2.8)$$

ahol $eU(\hat{\mathbf{R}}) = V_{\text{Coulomb}}(\hat{\mathbf{R}})$ a szokásos Coulomb-potenciál. Megjegyezzük, hogy a fény-atom kölcsönhatások során a kísérletekben, így az elméleti modellekben is használt fény hullámhossza messze meghaladja az atom vagy molekula méreteit. Például a hidrogén atom térbeli méreteit a Bohr-sugár jellemzi, ami kb. 0,053 nm, ezzel szemben a kísérletekben alkalmazott fényforrások tipikus hullámhossza nagyságrendileg 100 nm vagy e feletti. Éppen ezért igen gyakran a vektorpotenciál térbeli függését elhanyagoljuk, és az atommag helyén felvett értékét értjük alatta, amit dipól közelítésnek nevezünk.

A következőkben a vektor- és skalárpotenciál két leggyakoribb választását ismertetjük az (1.2.7) feltétel fennállása mellett, ez pedig az ún. sebességmérték,

illetve a hossz mérték. Dipól közelítésben minden további nélkül feltehetjük, hogy az elektromos mező két tag, egy térfüggő és egy időfüggő tag összegéből áll, azaz

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_r(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_t(t), \quad (1.2.9)$$

ahol az r és t alsó indexek a hely-, illetve időfüggésre utalnak. Ekkor a potenciálok egy lehetséges választása

$$\mathbf{A}_s(t) = - \int_{-\infty}^t \mathbf{E}_t(t') dt' \text{ és } U_s(\mathbf{r}) = - \int_{\infty}^{\mathbf{r}} \mathbf{E}_r(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (1.2.10)$$

amit sebesség mértéknek vagy $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ mértéknek nevezünk az után, hogy ebben a mértékben a Hamilton-operátor tartalmazza a részecske $\hat{\mathbf{v}} = (\hat{\mathbf{P}} - e\mathbf{A}(t))/m$ sebesség operátorát. A másik gyakori választás az ún. hossz mérték vagy Göppert-Mayer mérték, az alábbi potenciál választással,

$$\mathbf{A}_h(t) = 0 \text{ és } U_h(\mathbf{r}) = U_s(\mathbf{r}) - \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}_t(t). \quad (1.2.11)$$

Hossz mértékben a Hamilton-operátor

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V_{\text{Coulomb}}(\hat{\mathbf{R}}) - \hat{\mathbf{D}} \cdot \mathbf{E}_t(t), \quad (1.2.12)$$

ahol $\hat{\mathbf{D}} = e\hat{\mathbf{R}}$ a dipól momentum operátor.

Néhány kiegészítő megjegyzést kell tennünk az itt leírtakkal kapcsolatban. Az első, és talán legtöbbször félreértett, hogy csupán az elektrodinamika mértékszabadsága nem elég, ahhoz hogy a Schrödinger-egyenlet a különböző választott mértékekben továbbra is fennálljon, hanem a részecske hullámfüggvényét, a $|\Psi(t)\rangle$ állapotvektor koordináta reprezentációban vett alakját is transzformálni kell a kvantummechanika lokális fázisszabadságát felhasználva az alábbiak szerint.

$$\Psi'(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t) \exp \left\{ i \frac{e}{\hbar} \chi(\mathbf{r}, t) \right\}, \quad (1.2.13)$$

ahol $\chi(\mathbf{r}, t)$ korábban a potenciálok (1.2.6a)-(1.2.6b) transzformációjánál használt függvény. Továbbá analitikus számítások esetén megvan számunkra a mértékválasztás szabadsága, azonban numerikus módszerek esetén ez már sajnos nem igaz [28]. Ugyanis attól függően, hogy az iontörzshöz közeli avagy attól távoli folyamatokat vizsgálunk, eltérő az elérhető numerikus pontosság a sebesség-, illetve hossz mértékben felírt Schrödinger-egyenlet megoldása során. Az iontörzshöz közel a hossz mérték alkalmazása szolgáltat pontosabb eredményt, míg a magtól távol a sebesség mérték alkalmazása a célravezető.

1.2.2. Időfüggő perturbációs számítás

Amennyiben tüzetesebben megvizsgáljuk akár az (1.2.8) általános Coulomb-mértékben, akár az (1.2.12) hossz mértékben felírt Hamilton-operátort, láthatjuk, hogy az alábbi alakú.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{K}(t), \quad (1.2.14)$$

ahol \hat{H}_0 az időfüggetlen atomi Hamilton-operátor, amely tartalmazza a részecske kinetikus energiáját, valamint a potenciális energiáját az iontörzs Coulomb-mezőjében, $\hat{K}(t)$ a kölcsönhatási tag, és ahogy a neve is mutatja, a részecske és a külső elektromágneses mező kölcsönhatását írja le. Legtöbbször a \hat{H}_0 sajátértékegyenletének megoldása ismert,

$$\hat{H}_0 |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad (1.2.15)$$

ahol $|n\rangle$ az atom n -edik sajátállapot, és E_n az n -edik állapotnak megfelelő sajátenergia. Abban az esetben, ha $\hat{K}(t)$ operátor nem-diagonális mátrixelemei kicsik a \hat{H}_0 sajátállapotai közötti energiakülönbségekhez képest, azaz $\langle m | \hat{K}(t) | n \rangle \ll |E_n - E_m|$, akkor a fény-anyag kölcsönhatás az időfüggő perturbációs számítás keretei között tárgyalható. Mint tudjuk \hat{H}_0 sajátállapotai bázist alkotnak a Hilbert-téren, így a hullámfüggvény tetszőleges időpillanatban felírható mint a bázisvektortok lineáris kombinációja.

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle, \quad (1.2.16)$$

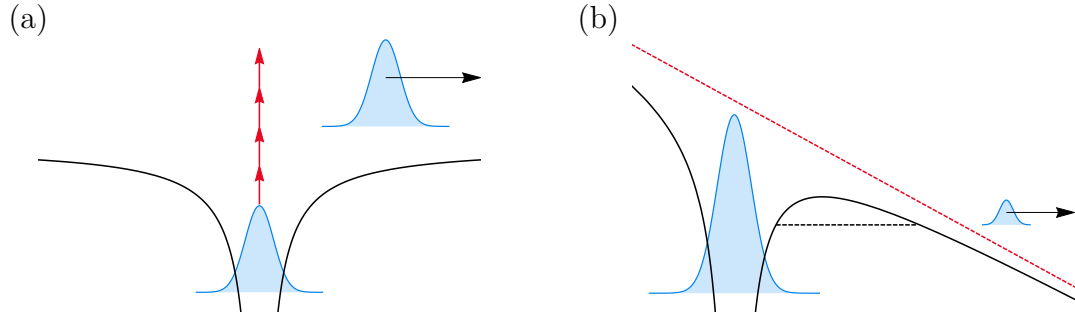
ahol $c_n(t)$ az időfüggő kifejtési együttható. Ezt behelyettesítve az (1.2.2) Schrödinger-egyenletbe, és projektálva \hat{H}_0 egyik sajátállapotára, jelöljük ezt m -mel, az időfüggő kifejtési együtthatókra az alábbi egzakt differenciálegyenlet-rendszert kapjuk.

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_m(t) = \sum_n \langle m | \hat{K}(t) | n \rangle e^{-i(E_m - E_n)t/\hbar} c_n(t). \quad (1.2.17)$$

A fenti egyenletrendszert iteratív módon szokás megoldani, szem előtt tartva, hogy az n -ed rendű kifejtési együttható a perturbációs operátor n -edik hatványától függ, így a perturbáció mértékétől függően egy bizonyos rend feletti járulékot már jó közelítéssel elhanyagolhatunk.

1.2.3. Nem-perturbatív elméleti modellek

Sok esetben az időfüggő perturbációs számítás nem alkalmazható, mert a Hamilton-operátor kölcsönhatási részének mátrixelemei összemérhetőek az időfüggetlen rész diagonális elemeivel, más szóval a feltételezett lézertér olyan nagy intenzitású



1.2.1. ábra. Az atomi ionizáció többfotonos (a), illetve alagutazásos (b) modellje. (a) Az atomi Coulomb-potenciál által kötött elektron hullámfüggvénye együttesen több fotont elnyelve (ezt szemléltetik a piros nyilak) kiszabadul a kötött állapotból, és szabaddá válik. (b) A lézerintenzitás olyan erős, és frekvenciája olyan alacsony, hogy a kötött állapotban lévő elektron hullámfüggvényének egy kis része képes túljutni a lézertér és az atomi Coulomb-potenciál összegéből képzett potenciálgáton, amelyet a kvantummechanikai folyamatot modellező klasszikus részecske alagúteffektusaként reprezentálunk.

($> 10^{13} \text{ W/cm}^2$), hogy az elektromos mezője összemérhető az atomi Coulomb-mezővel. Ekkora lézerintenzitások mellett a vizsgált rendszer már nemlineáris válaszreakciót mutat, és több foton együttes kibocsájtása vagy elnyelése lesz a domináns folyamat. Számos ilyen esetet ismerünk, mint a többfotonos gerjesztés vagy stimulált emisszió [29, 30, 31], a molekulák többfotonos disszociációja [32], illetve a magasrendű harmonikus-keltés [33, 34, 35, 36] vagy küszöb fölötti ionizáció [37, 38]. Az 1.2.1. ábrán további két fontos folyamatot mutatunk be: a többfotonos ionizációt, amikor a külső elektron együttesen több fotont elnyelve ionizálódik, valamint az értekezés 3. fejezetében részletesen is tárgyalt erős lézertérben lejátszódó ionizáció, amikor a kötött állapotban lévő elektron valamilyen kvantummechanikai effektus, az ábrán optikai alagúteffektus, révén átjut az atomi Coulomb-potenciál és a lézertér potenciáljának összegéből kialakuló potenciálgáton. Azt, hogy adott atomra, milyen lézertér paraméterek mellett melyik ionizációs csatorna van „nyitva”, azaz melyik ionizációs folyamat a valószínűbb a Keldysh-paraméter értéke alapján következtethetünk [39].

$$\gamma = \omega \frac{\sqrt{2m_e I_p}}{eE_0} \quad (1.2.18)$$

ahol m_e és e az elektron tömege, valamint töltése, ω a lézertér frekvenciája, E_0 a maximális térerőssége, I_p az atom ionizációs energiája. Abban az esetben, ha $\gamma \ll 1$ az alagúteffektussal történő ionizációs folyamat a domináns, de ha $\gamma \gg 1$ akkor a többfotonos ionizációs folyamat a leginkább jelentős, amit kísérletileg is igazoltak az ionizációs spektrumot vizsgálva. Amikor a Keldysh-paraméter jelentősen különbözik egytől, akkor valóban csak az egyik ionizációs csatorna

járuléka jelentős. Azonban amikor az értéke közel van egyhez, akkor a spektrum nagyon összetett, összhangban azzal, hogy ekkor mindkét ionizációs folyamat lényeges [40].

Az előbb tárgyalt fizikai szituációkban vagy másfajta, közelítő, nem-perturbatív eljárásokhoz folyamodunk, mint a Volkov-állapotok alkalmazása [41, 42], a Floquet-elmélet [43], a magasrendű harmonikus-keltés 3-lépéses modellje [35], illetve a nyeregponthoz tartozó egyenletek megoldása [36], amelyek jól működnek a lézerintenzitás bizonyos tartományaira, azonban ezen kívül nem alkalmazhatók megfelelően, vagy numerikusan megoldjuk a Schrödinger-egyenletet. Ez utóbbi módszer a lézerintenzitás és frekvencia teljes tartományára alkalmazható, természetesen különböző számítási erőforrásigénnyel.

1.2.4. Wigner-függvény

Az alábbiakban a kvantummechanikában a részecske fázistéren történő leírására leginkább használt eszközt, a Wigner által 1932-ben bevezetett [44], és később róla elnevezett Wigner-függvényt mutatjuk be.

A Wigner-függvény nem más, mint egy fázistéren értelmezett eloszlásfüggvény, például a Boltzmann-eloszlás, kvantummechanikai általánosítása. Egy olyan függvény, amely Fourier-transzformáció nélkül egyszerre függ az általánosított koordinátától és impulzustól, azaz a két kvadratúra „koordinátáitól”.

Általánosan egy dimenzióban a $|\Psi(t)\rangle$ kvantumállapothoz tartozó Wigner-függvény az alábbi alakú.

$$W_{\Psi}(x, p, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Psi(t) | e^{i(\lambda\hat{X} + \mu\hat{P})/\hbar} | \Psi(t) \rangle e^{i(\lambda x + \mu p)/\hbar} d\lambda d\mu, \quad (1.2.19)$$

ahol \hat{X} és \hat{P} a két kvadratúrához tartozó operátor, x és p pedig a hozzájuk tartozó valós koordináta. Tekintsük most az egyszerűség kedvéért a szokásos koordinátát és impulzust. Operátor azonosságokat, valamint disztribúcióelméleti összefüggéseket felhasználva a Wigner-függvény alakja koordinátareprezentációban

$$W(x, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x + \xi, t) \Psi(x - \xi, t) e^{2ip\xi/\hbar} d\xi, \quad (1.2.20)$$

és impulzusreprezentációban

$$W(x, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\Psi}^*(p - \xi, t) \tilde{\Psi}(p + \xi, t) e^{2ix\xi/\hbar} d\xi, \quad (1.2.21)$$

ahol $\tilde{\Psi}(p, t)$ jelöli a hullámfüggvényt impulzusreprezentációban. A Wigner-függvényt kvázi valószínűségi sűrűségfüggvénynek nevezzük, mert bár valós értékű, de negatív értékeket is felvehet, ami nem lehetséges klasszikus eloszlásfüggvények esetén. Ugyanakkor a Wigner-függvény a helyes marginális eloszlásokat adja vissza, azaz

$$|\Psi(x, t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} W(x, p, t) dp, \text{ és } |\tilde{\Psi}(p, t)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} W(x, p, t) dx. \quad (1.2.22)$$

A későbbiekben szükségünk lesz még a Wigner-függvény mint valószínűségi sűrűségfüggvény p -szerinti momentumaira, azaz

$$P_n(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} p^n W(x, p, t) dp. \quad (1.2.23)$$

Ezek fizikai jelentéséről később, a 3. fejezetben történő alkalmazásuk során ejtünk szót. Megjegyezzük, hogy a Wigner-függvénynek létezik relativisztikus kvantumelektrodinamikai problémák esetén alkalmazható mérték-invariáns formája is [45, 46, 47].

A Wigner-függvény dinamikai egyenletét az alábbi egyszerű gondolatmenet alapján írhatjuk fel. Tekintsük a (1.2.20) egyenlet idő szerinti deriváltját,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} W(x, p, t) &= \frac{1}{\pi \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial \Psi^*(x + \xi, t)}{\partial t} \Psi(x - \xi, t) + \Psi^*(x + \xi, t) \frac{\partial \Psi(x - \xi, t)}{\partial t} \right] \\ &\quad \times e^{2ip\xi/\hbar} d\xi, \end{aligned} \quad (1.2.24)$$

és használjuk fel a (1.2.2) Schrödinger-egyenlet koordinátareprezentációba vett alakját. Ekkor az alábbi egyenletet kapjuk.

$$\frac{\partial}{\partial t} W(x, p, t) = \frac{\partial}{\partial t} W_T(x, p, t) + \frac{\partial}{\partial t} W_V(x, p, t), \quad (1.2.25)$$

ahol

$$\begin{aligned} \frac{\partial W_T(x, p, t)}{\partial t} &= \frac{1}{2\pi m i} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial^2 \Psi^*(x + \xi, t)}{\partial x^2} \Psi(x - \xi, t) \right. \\ &\quad \left. - \Psi^*(x + \xi, t) \frac{\partial^2 \Psi(x - \xi, t)}{\partial x^2} \right] \times e^{2ip\xi/\hbar} d\xi, \end{aligned} \quad (1.2.26a)$$

és

$$\begin{aligned} \frac{\partial W_V(x, p, t)}{\partial t} &= \frac{1}{\pi \hbar^2 i} \int_{-\infty}^{\infty} (V(x + \xi, t) - V(x - \xi, t)) \\ &\quad \times \Psi^*(x + \xi, t) \Psi(x - \xi, t) e^{2ip\xi/\hbar} d\xi. \end{aligned} \quad (1.2.26b)$$

Elvégezve néhány egyszerű matematikai átalakítást a fenti két egyenlet a következő alakot ölti.

$$\frac{\partial W_T(x, p, t)}{\partial t} = -\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} W(x, p, t), \quad (1.2.27a)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial W_V(x, p, t)}{\partial t} &= \sum_{k=0}^{\infty} \left(-\frac{\hbar}{2}\right)^{2k} \frac{1}{(2k+1)!} \frac{\partial^{2k+1} V(x, t)}{\partial x^{2k+1}} \\ &\quad \times \left(\frac{\partial}{\partial p}\right)^{2k+1} W(x, p, t). \end{aligned} \quad (1.2.27b)$$

A (1.2.25) egyenlet a (1.2.27a) és a (1.2.27b) összefüggésekkel fizikailag meg-
egyezik a Schrödinger-egyenlet megoldásával. Továbbá, megvizsgálva a (1.2.27b)
egyenletet, látható, hogy olyan $V(x, t)$ potenciál esetén, amelynek harmad- és
magasabb rendű deriváltjai eltűnnek, a végtelen sor csupán egyetlen tagból áll,
és a (1.2.25) dinamikai egyenlet a

$$\frac{\partial}{\partial t} W(x, p, t) = -\frac{p}{m} \frac{\partial W(x, p, t)}{\partial x} + \frac{\partial V(x, t)}{\partial x} \frac{\partial W(x, p, t)}{\partial p} \quad (1.2.28)$$

klasszikus Liouville-egyenletté redukálódik. Tehát, maximum koordinátában kvad-
ratikus $V(x, t)$ potenciál esetén a Wigner-függvény „mozgása” a fázistéren meg-
egyezik egy ugyanezen potenciál hatása alatt álló klasszikus részecske mozgásával.

1.3. Kvantumos anyag, kvantált fény: kvantum-optika, kvantum - elektrodinamika

Kétség kívül a fény-anyag kölcsönhatás leírásánál akkor járunk el a legpontosabban, ha a kölcsönhatásban szereplő mindkét részvevőt, úgy a fényt, mint az anyagot kvantummechanikai objektumként kezeljük [48, 49]. Azokban a fizikai szituációkban érdemes így eljárjunk, amikor a kölcsönhatás során a fény kvantum tulajdonságainak kulcsfontosságú szerepe van, így klasszikus mezőként leírva lényeges információt vesztenénk el. Ennek két fontos határesetét különböztetjük meg. Az egyik, amikor az anyag nagyon gyenge, csupán néhány fotont tartalmazó mezővel lép kölcsönhatásba, például Haroche és csoportja által 1996-ban elvégzett és 2012-ben Nobel-díjjal jutalmazott kísérlet [50, 51], vagy egy erős lézertérrel történő kölcsönhatás esetén a gerjesztett anyag a nemlineáris válaszreakció során csupán néhány fotont bocsájt ki, például Tzallas és munkatársai által vizsgált magasrendű-harmonikus-keltés esetén [52, 53]. A másik, amikor az akár gyenge, akár intenzív elektromágneses mező frekvenciája, vagyis a fotonok energiája összemérhető az elektron nyugalmi tömegével. Ez utóbbi esetben az anyagot ún. másod-kvantált formalizmusban szükséges leírni, ezzel azonban jelen értekezés keretein belül nem foglalkozunk. Természetesen, ahogy a későbbiekben szó lesz róla, egy erős, optikai tartományhoz közel eső elektromágneses mezőt is leírhatunk kvantum-elektrodinamikai térmennyiségekkel, azonban ez néhány kivételes esettől eltekintve szükségtelenül bonyolult számításokhoz vezet, ráadásul ugyanazzal az eredménnyel, mint a korábban látott, egyszerűbb modellek.

1.3.1. Kvantált elektromágneses mező és a foton

A következőkben dióhéjban a kvantumoptikában leginkább használt kvantálási eljárást mutatjuk be, amely a mező normál módusokra bontásán, majd ezen módusok harmonikus oszcillátorokhoz hasonló kvantálásán alapszik. Megjegyezzük, hogy a kvantumtérelméletben a mező Lagrange-sűrűségével, valamint az ebből kapható kanonikusan konjugált változópárokkal szokás a mező kvantálását elvégezni.

A normál módusokra való felbontást a reciprok térben végezzük el, ahova a

Fourier-transzformációval térhetünk át.

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{r}, \quad (1.3.1a)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{k}, \quad (1.3.1b)$$

ahol \mathbf{k} a reciprok tér változója, és látható, hogy az $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ elektromos térerősségvektor felírható $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ síkhullámok folytonos szuperpozíciójaként $\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t)$ kifejtési együtthatóval. Ezek alapján megkaphatjuk az (1.1.2a)-(1.1.2d) Maxwell-Lorentz egyenleteket a reciprok térben érvényes formáját.

$$i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{\varepsilon_0} \tilde{\rho}(\mathbf{k}, t), \quad (1.3.2a)$$

$$i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) + \dot{\tilde{\mathbf{B}}}(\mathbf{k}, t) = 0, \quad (1.3.2b)$$

$$i\mathbf{k} \cdot \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t) = 0, \quad (1.3.2c)$$

$$i\mathbf{k} \times \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t) - \varepsilon_0 \mu_0 \dot{\tilde{\mathbf{E}}}(\mathbf{k}, t) = \mu_0 \tilde{\mathbf{J}}(\mathbf{k}, t), \quad (1.3.2d)$$

ahol a hullámjel a megfelelő mennyiségek reciprok térbeli alakját jelöli. Akár a valós, akár a reciprok térben felírt Maxwell-Lorentz egyenletek következménye, hogy a mágneses mezőt leíró vektormező vektoranalitikai értelemben transzverzális, az elektromos térerősség vektor pedig felbontható egy transzverzális és egy longitudinális részre. Ez utóbbi, longitudinális rész a töltéseloszlás adott időpillanatban felvett értékétől függően, így sztatikus Coulomb-mezőként értelmezhetjük.

Ehhez hasonlóan az elektromágneses mező teljes energiáját szintén fel tudjuk bontani egy longitudinális és egy transzverzális részre.

$$H_{\text{mező}} = H_{\text{lon}} + H_{\text{tr}} = \frac{\varepsilon_0}{2} \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(\mathbf{k}, t)|^2 d^3\mathbf{k} + \frac{\varepsilon_0}{2} \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\mathbf{E}}_{\perp}(\mathbf{k}, t)|^2 + c^2 |\tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{k}, t)|^2 d^3\mathbf{k}. \quad (1.3.3)$$

Ahogy korábban említettük a H_{lon} nem más, mint a sztatikus Coulomb-mezőhöz tartozó energia, így a továbbiakban H_{tr} lesz az érdeklődésünk középpontjában. Az (1.3.2b)-(1.3.2d) rotációs Maxwell-Lorentz egyenleteket felhasználva az alábbi dinamikai egyenletet nyerjük,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\tilde{\mathbf{E}}_{\perp} \mp c \frac{\mathbf{k}}{k} \times \tilde{\mathbf{B}} \right) = \mp i\omega \left(\tilde{\mathbf{E}}_{\perp} \mp c \frac{\mathbf{k}}{k} \times \tilde{\mathbf{B}} \right) - \frac{1}{\varepsilon_0} \tilde{\mathbf{J}}, \quad (1.3.4)$$

ahol $k = |\mathbf{k}|$, valamint $\omega := ck$ módon definiáltuk a módushoz tartozó körfrekvenciát. Ha a fenti dinamikai egyenletben, a mezőt jellemző mennyiségek

segítségével, bevezetünk $\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}, t)$ normál-koordinátákat,

$$N(k) \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}, t) := -\frac{i}{2} \left(\tilde{\mathbf{E}}_{\perp} - c \frac{\mathbf{k}}{k} \times \tilde{\mathbf{B}} \right), \quad (1.3.5)$$

ahol $N(k)$ egy alkalmasan megválasztott normálási tényező, akkor a mező transzverzális energiája az alábbi egyszerű alakban írható fel.

$$H_{\text{tr}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\hbar\omega}{2} (\boldsymbol{\alpha}^*(\mathbf{k}, t) \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}, t) + \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{k}, t) \boldsymbol{\alpha}^*(\mathbf{k}, t)) d^3\mathbf{k} \quad (1.3.6)$$

Vizsgáljuk most a mezőt egy üregben, amit az általánosság megcsorbítása nélkül tekinthetünk egy kockának, melynek határain periodikus határfeltételt írunk elő. Ebben a kockában, azaz a kvantálási térfogatban a mező transzverzális energiája a folytonos dinamikai változók integrálja helyett, diszkrét változók végtelen összegeként áll elő.

$$H_{\text{tr}} = \sum_n \frac{\hbar\omega_n}{2} (\alpha_n^* \alpha_n + \alpha_n \alpha_n^*). \quad (1.3.7)$$

Ezen a ponton bevezetünk a normál-koordináták helyett operátorokat,

$$\alpha_i \rightarrow \hat{a}_i, \quad \alpha_i^* \rightarrow \hat{a}_i^{\dagger}, \quad (1.3.8)$$

előírva az alábbi felcserélési relációt,

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^{\dagger}] = \delta_{i,j}, \quad (1.3.9)$$

ahol $\delta_{i,j}$ a Kronecker-delta. Így a Hamilton-operátor a harmonikus oszcillátor kvantummechanikai tárgyalásánál megismert matematikai alakot ölti.

$$\hat{H}_{\text{tr}} = \sum_n \hbar\omega_n \left(\hat{a}_i^{\dagger} \hat{a}_i + \frac{1}{2} \right), \quad (1.3.10)$$

ahol \hat{a}_i^{\dagger} operátort a mezőben egy fotont keltő, míg \hat{a}_i operátort a mezőből egy fotont eltüntető operátorként reprezentálunk.

1.3.2. A mező nevezetes állapotai

A mező egy általános állapotát az egyes módusok Hilbert-terének tenzorszorzatán adjuk meg, azaz

$$\mathcal{H}_{\text{mező}} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \dots, \quad (1.3.11)$$

amit Fock-térnek nevezünk. A Fock-tér egy általános eleme, azaz a mező egy általános állapota a következő módon írható fel,

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_1=0}^{\infty} \sum_{n_2=0}^{\infty} \dots c_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle. \quad (1.3.12)$$

Ennek legegyszerűbb esete, amikor a sok módus közül egyetlenegy tartalmaz n számú fotont, ekkor a mező ún. számállapotban van,

$$|\Psi\rangle = |n\rangle. \quad (1.3.13)$$

Fontos megemlíteni, hogy a számállapotok messze nem-klasszikus állapotok, ami-re egy jó példa, hogy n bármilyen nagy is, azaz bármennyi foton van az adott módusban, az elektromos térerősség operátorának várható értéke ebben az állapotban zérus.

A kvantumoptikai kísérletek szempontjából nagyon fontosak az ún. egyfotonos állapotok, amikor az l -edik módusban egy foton van, amelynek általános időfüggő alakja az alábbi,

$$|1(t)\rangle = \sum_l c_l e^{-i\omega t} |0, 0, \dots, n_l = 1, 0, \dots\rangle. \quad (1.3.14)$$

Ilyen egyfotonos állapotok kísérleti megvalósítása általában arra alkalmas üregben történik.

Mind a kísérletek, mind az elméleti leírás szempontjából másik fontos mező állapot az ún. koherens állapot, ami annak az itt nem részletezett ténynek a következménye, hogy klasszikus forrás (lásd 1.1. fejezet) koherens állapotú mezőt kelt. Egy általános időfüggő koherens állapot az alábbi alakú.

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha(t)|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha(t)^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle, \quad (1.3.15)$$

ahol $|n\rangle$ jelöli a mező számállapotait, $\alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega t}$ a koherens állapot időfüggő paramétere, amiben α_0 a kezdeti koherens állapotra jellemző komplex paraméter. A koherens állapot fontos tulajdonsága, hogy minimalizálja a Heisenberg-egyenlőtlenséget a megfelelő elektromos, valamint mágneses mezőhöz tartozó kvadrátúra operátorokkal.

II. rész

Új tudományos eredmények

2. fejezet

Attoszekundumos fényimpulzus előállítása relativisztikus Thomson-szórással

2.1. Bevezetés és irodalmi áttekintés

Ebben fejezetben a relativisztikus Thomson-szórással, mint attoszekundumos fényimpulzus forrással kapcsolatos eredményeinket ismertetjük. Az elméleti modellezés során támaszkodni fogunk az 1.1. szakaszban leírtakra, természetesen kiegészítve, hozzáigazítva a tárgyalt kölcsönhatás sajátosságaihoz.

Elektromágneses hullám töltött részecskén történő Thomson-szórása a klasszikus elektrodinamikából jól ismert jelenség [12, 13, 54], a Compton-szórás alacsony energiás határesetének tekinthető. Akkor beszélünk Thomson-szórásról, amikor a bejövő elektromágneses hullámot alkotó fotonok $\hbar\omega_L$ energiája messze elmarad a szóró centrumként szolgáló töltött részecske γmc^2 energiájától, azaz

$$\hbar\omega_L \ll \gamma mc^2, \quad (2.1.1)$$

amely feltétel természetesen Compton-szórás esetén nem áll fenn.

Attól függően, hogy a bejövő elektromágneses hullám mekkora intenzitású, beszélhetünk lineáris, illetve nemlineáris Thomson-szórásról. Ahhoz, hogy el tudjuk különíteni ezt a két tartományt, vezessük be az elektromágneses mező dimenziótlan vektorpotenciálját,

$$a_0 = \frac{|e| E_0}{mc\omega_L}, \quad (2.1.2)$$

ami fizikailag az m tömegű, e töltésű részecske transzverzális impulzusának mértéke mc egységekben, miközben kölcsönhat E_0 amplitúdójú és ω_L körfrekvenciájú elektromágneses síkhullámmal. Lineárisan polarizált lézertérre λ_L hullámhossz és

I_0 intenzitás függvényében az alábbi módon számolhatjuk ki,

$$a_0 = 0,85 \left(\frac{\lambda_L}{1 \mu\text{m}} \right) \left(\frac{I_0}{10^{18} \text{ W/cm}^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (2.1.3)$$

Azokban az esetekben, amikor $a_0 \ll 1$, a kezdetben nyugalomban lévő elektron ω_L frekvenciával kis amplitúdójú rezgésbe kezd, így a Thomson-szórás spektrumában csupán ez az egyetlen frekvencia lesz jelen, azaz lineáris jelenségről beszélünk. Ahogyan a_0 -t növeljük az elektron oszcillációjának frekvenciája kezd eltérni a lézertér körfrekvenciájától. Ha a dimenziótlan vektorpotenciál értéke eléri az egységnyi értéket, a Lorentz-erő mágneses részének hatása is meghatározóvá válik, és az elektron a lézertér terjedésének iránya mentén is oszcillálni kezd a transzverzális oszcilláció mellett, sőt egy terjedés irányú szisztematikus eltolódás is jellemzi. Ekkor a szórt spektrumban megjelennek ω_L felharmonikusai is. Amikor $a_0 \gg 1$, az elektron longitudinális oszcillációjának amplitúdója jócskán meghaladja a transzverzális oszcillációjának amplitúdóját, aminek a periódusideje szintén jóval nagyobb, mint a lézertér optikai ciklusa. Ekkor az elektron mozgása már magasan nemlineáris, így a szórt sugárzásban főként a bejövő elektromágneses mező frekvenciájának felharmonikusai jelennek meg, felharmonikusként eltérő szögeloszlással [55, 56, 57, 58]. Ehhez a relativisztikus sebességekkel történő oszcillációhoz hozzájárulhat, ha az elektron már kezdetben a fénysebességhez közeli sebességgel rendelkezik. Ekkor a szóródó elektromágneses mező további relativisztikus Doppler-eltolódást szenved, és a szóródó sugárzás frekvenciája frontálisan történő ütközés, valamint lineárisan polarizált bejövő fény esetén [59]

$$\omega \approx \frac{4\gamma_0^2 \omega_L}{1 + \gamma_0^2 \vartheta^2 + a_0^2/2}, \quad (2.1.4)$$

ahol ϑ a szórási szög, melyről feltételezzük, hogy kicsi. Az elméleti leírás szempontjából, ahogyan mi is a következőkben, leginkább az 1.1. szakaszban is látott klasszikus anyag, klasszikus fény modellt használják, azonban főként a relativisztikus tárgyalásnál nem ritka a kvantummechanikai modellek alkalmazása.

Kísérleti szempontból a Thomson-szórást, mint nagy fotonenergiájú sugárzás, leginkább röntgen- és gamma-sugárzás forrásaként alkalmazzák [60, 61], kihasználva a szórt sugárzás közel monoenergetikus tulajdonságát [62, 63].

Az a tény, hogy az elmúlt egy-két évtizedben számos úttörő elméleti munkát és kísérleti eredményt publikáltak elektroncsomagok bizonyos paramétereinek kísérleti szabályozhatóságával kapcsolatban, még inkább ígéretes kutatási területté teszi a relativisztikus Thomson-szórást, mint lehetséges attoszekundumos fényimpulzus forrást. Elemi hullámoptikai megfontolások alapján, akkor kaphatunk a szórt sugárzásban széles spektrális tartományon konstruktív interferenciát, ha az

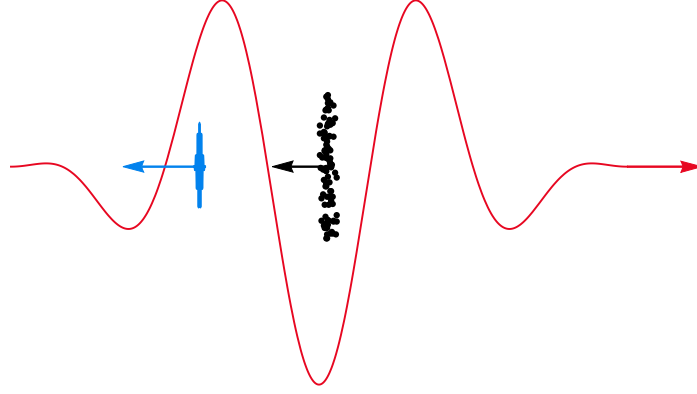
alkalmazott elektroncsomag elegendően sűrű, és a longitudinális mérete összemérhető a kisugárzott fény hullámhosszával. A szakirodalomban elsők között Mourou és kollégái vetették fel szimulációk alapján attoszekundumos elektroncsomag megvalósíthatóságának ötletét szilárdtest és p-polarizált lézertér kölcsönhatása során [64]. 10 évvel később Sell és Kärtner szimuláltak hasonlóan jó tulajdonságú elektroncsomagot radiálisan polarizált alacsony intenzitású lézertér jelenlétében elektroncsomag „összenyomása” révén [65].

Különböző fizikai folyamatokban több ígéretes kísérleti eredmény is mutatja a szimulációkhoz hasonló paraméterrel rendelkező elektroncsomagok előállításának lehetőségét [66, 67]. Például elektroncsomag gyorsítással történő feldarabolásával már pC töltésű, és 10 fs-nál rövidebb elektroncsomagot sikerült előállítani a MeV energiatartományban [68, 69, 70]. Több kísérleti csoport végez lézeres plazmagyorsítási kísérleteket, ahol beszámoltak már kvázi-monoenergetikus femtoszekundumos vagy még ennél is rövidebb elektroncsomag sorozat előállításáról [71, 72, 73], sőt egy csoport izolált elektroncsomagot is előállított a MeV-os energiatartományban 10-100 pC töltéssel, ami nagyságrendileg $10^7 - 10^8$ elektront jelent [74].

2.2. Célkitűzések

Az előző szakaszban bemutatott, a relativisztikus Thomson-szórással kapcsolatos eredményekre, valamint a relativisztikus elektron nano-csomagokkal összefüggő úttörő szimulációkra és kísérletekre alapozva célul tűztük ki, hogy új, alternatív módszert keressünk attoszekundumos fényimpulzus előállítására.

A manapság leginkább laboratóriumi rutinnak tekinthető eljárás, a nemesgáz atomokon történő felharmonikus-keltés egyik fő problémája, hogy az általuk létrehozott attoszekundumos fényimpulzus intenzitása felülről, míg az elérhető impulzushossz alulról limitált. Hiszen az atomokból vagy molekulákból álló mintán sem lehet akármilyen nagy intenzitású lézerimpulzust alkalmazni, mert a túl intenzív lézertér ionizálja a gázt, így a rekombináció és az ultraibolya sugárzás kibocsátása nem valósul meg. Ahogyan a 2.2.1. ábrán is látszik, a Thomson-szórás azon esetét céloztuk megvizsgálni, amikor a kezdetben relativisztikus sebességre gyorsított, „ideálisként” kezelt elektroncsomag, azaz szabad töltések, kölcsönhatásba lépnek az intenzív lézertérrel, mely kölcsönhatás során gyorsulnak, így maguk is elektromágneses sugárzás forrásává válnak. Ez a másodlagos sugárzás pedig bizonyos körülmények között, a relativisztikus effektusoknak (pl. a frekvencia relativisztikus Doppler-eltolódásának) vagy a sugárzó elektronok konstruktív interferenciájának köszönhetően, lehetőséget biztosíthat makroszkopikusan detektálható, és kísérletekben felhasználható attoszekundumos fényimpulzus előállítására. Cél-



2.2.1. ábra. Ebben a fejezetben vizsgált Thomson-szórás sematikus ábrája. A pirossal jelölt intenzív, néhány ciklusos lézerpulzus szóródik a fekete pontokkal jelölt elektronsomagon, amelynek eredményeképpen a kékkel ábrázolt attoszekundumos fényimpulzus áll elő.

kitűzéseink között szerepelt továbbá, hogy tanulmányozzuk a kollektív sugárzás tulajdonságait, és rávilágítsunk, hogy bizonyos tekintetben jobb paraméterekkel rendelkező attoszekundumos fényimpulzust állíthatunk elő, mint a nemesgáz atomok használatával. Az ebben a fejezetben ismertetésre kerülő eredmények a [T1,T2,T3] publikációkon alapulnak.

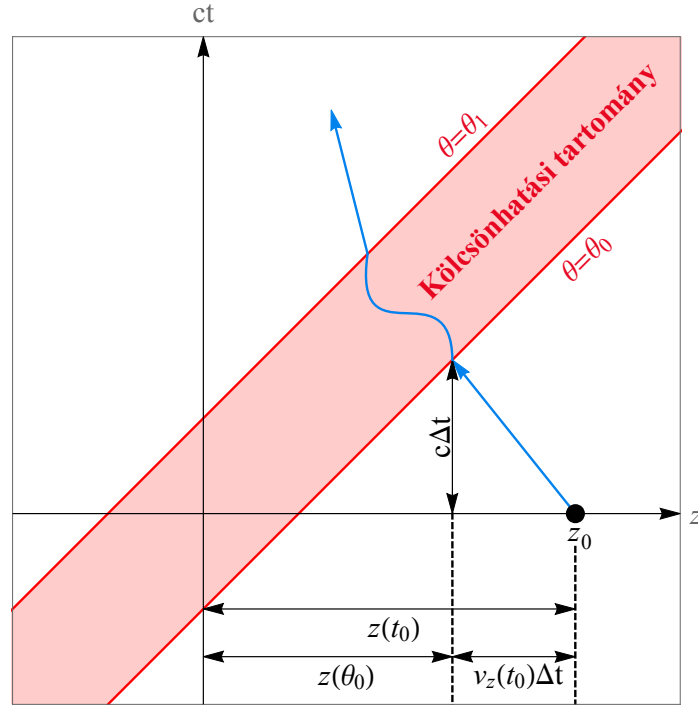
2.3. A mozgásegyenlet és megoldása

2.3.1. A mozgásegyenlet visszavezetése kvadraturára

Tekintsük most egy m tömegű és e töltésű elektron kölcsönhatását egy lineárisan polarizált lézerpulzussal. Vegyük fel a koordináta-rendszerünket úgy, hogy a lézertér x -irányban polarizált és z -irányba terjedő legyen. Továbbá modellezzük a lézerpulzust a szakirodalomban gyakran használt szinusz négyzet burkolóval. Ekkor az elektromos térerősség értéke t időpillanatban és \mathbf{r} helyvektorral jelölt helyen,

$$\mathbf{E}\left(t - \frac{\mathbf{n}_L \mathbf{r}}{c}\right) = E_0 \hat{\mathbf{e}}_x \sin^2\left(\frac{\omega_L}{2n_c}\left(t - \frac{\mathbf{n}_L \mathbf{r}}{c}\right)\right) \cos\left(\omega_L\left(t - \frac{\mathbf{n}_L \mathbf{r}}{c}\right) + \varphi_0\right), \quad (2.3.1)$$

ahol E_0 az elektromos térerősség maximális értéke, $\hat{\mathbf{e}}_x$ a lézertér polarizációjának, \mathbf{n}_L pedig a terjedésének iránya, ω_L a lézerpulzus központi frekvenciája, n_c az optikai ciklusok száma a burkoló alatt, illetve φ_0 az ultrarövid lézerpulzusok egyik fontos paramétere a vivő-burkoló fáziskülönbség. Jelöljük az egyszerűség



2.3.1. ábra. Elektron és lézerpulzus Thomson-szórásának tér-idő diagramja frontálisan történő ütközés esetén. A fekete ponttal jelölt, kezdetben $v_z(t_0)$ sebességgel rendelkező elektron kölcsönhatásba lép egy z -irányba terjedő lézerpulzussal, melynek az elejét és a végét jelölik a vörös egyenesek. Az elektron világvonalát kékkel jelöltük. Az ábrán látható egyéb jelölések a 2.3.3. szakaszban leírt, a kezdeti értékek transzformációjával kapcsolatos geometriai megfontolásokat szemléltetik.

kedvéért az idő dimenziójú hullám argumentumot Θ -val,

$$\Theta = t - \frac{\mathbf{n}_L \mathbf{r}}{c} \quad (2.3.2)$$

Feltesszük, hogy a kölcsönhatás során a lézertér transzverzális profilja nem játszik szerepet, így ennek a hatását elhanyagoljuk, így viszont megőrizzük az analitikus tárgyalásmód előnyeit. A transzverzális nyalábprofil hatását hasonló folyamatokban a [75, 76, 77, 78] publikációkban tanulmányozták.

A fentiek alapján az (1.1.6) Newton-Lorentz egyenletek, valamint az (1.1.8) relativisztikus munkatétel alakja a következő

$$m \frac{d\mathbf{u}}{d\tau} = \frac{e}{c} \left[u^0 \mathbf{E}(\Theta) + \mathbf{n}_L (\mathbf{u} \cdot \mathbf{E}(\Theta)) - \mathbf{E}(\Theta) (\mathbf{n}_L \cdot \mathbf{u}) \right], \quad (2.3.3a)$$

$$m \frac{du^0}{d\tau} = \frac{e}{c} \mathbf{u} \cdot \mathbf{E}(\Theta), \quad (2.3.3b)$$

ahol kihasználtuk, hogy elektromágneses síkhullám esetén fennáll a $\mathbf{B}(\Theta) = \mathbf{n}_L \times \mathbf{E}(\Theta)/c$ összefüggés.

Tegyük fel továbbá, hogy az elektron kezdetben relativisztikus, tehát a fényse-

bességgel összemérhető sebességgel rendelkeznek, és a sebességvektora a koordináta-rendszerünk z -tengelyével párhuzamos, azonban ellentétes irányú. A kölcsönhatás sematikus illusztrációját a $ct - z$ síkban mutatja a 2.3.1. ábra. Régóta ismert tény, hogy megfelelő matematikai tulajdonságokkal bíró elektromágneses teret feltételezve a (2.3.3a)-(2.3.3b) egyenleteknek létezik általános analitikus megoldása, kihasználva, hogy az elektron τ sajátideje és a Θ hullámargumentum között lineáris kapcsolat van [79, 80, 81, 82].

$$u^0 - u^3 = \frac{d}{d\tau} (ct - z) = c \frac{d\Theta}{d\tau} = c\alpha, \quad (2.3.4)$$

ahol

$$\alpha = \gamma \left(1 - \frac{v_z}{c} \right), \quad (2.3.5)$$

dimenziótlan mozgásállandó, így az értékét az elektron kezdeti sebessége egyértelműen meghatározza az értékét.

2.3.2. Megoldás szinusznégyszet burkolójú lézerimpulzus esetén

Korábban, a (2.3.1)-ben látott szinusz négyzet burkolójú lézerimpulzus alak típusokra a (2.3.3a)-(2.3.3b) egyenletek megoldása az alábbi,

$$x(\Theta) = x(\Theta_0) + V_{x_0}(\Theta - \Theta_0) + c\omega(\Theta), \quad (2.3.6a)$$

$$y(\Theta) = y(\Theta_0) + V_{y_0}(\Theta - \Theta_0), \quad (2.3.6b)$$

$$z(\Theta) = z(\Theta_0) + \lambda_z(\Theta - \Theta_0) + V_{x_0}\omega(\Theta) + \delta(\Theta) \quad (2.3.6c)$$

$$ct(\Theta) = ct(\Theta_0) + \lambda_t(\Theta - \Theta_0) + V_{x_0}\omega(\Theta) + \delta(\Theta). \quad (2.3.6d)$$

Látható, hogy a $ct(\Theta)$ időszerű komponensnek ugyanolyan funkcionális alakja van, mint a $z(\Theta)$ -nak, hiszen a hozzájuk tartozó differenciálegyenlet ugyanaz, csupán a kezdeti értékekben különböznek. A fentiekben bevezettünk sebesség dimenziójú mennyiségeket, amelyek kivétel nélkül a kölcsönhatás kezdeti paramétereitől függenek, és az alábbi alakúak.

$$V_{x_0} = \alpha^{-1}u^1(\Theta_0) + cf(\Theta_0), \quad (2.3.7a)$$

$$V_{y_0} = \alpha^{-1}u^2(\Theta_0), \quad (2.3.7b)$$

$$V_{z_0/t_0} = \alpha^{-1}u^{3/0}(\Theta_0) + g(\Theta_0) + h(\Theta_0) + l(\Theta_0), \quad (2.3.7c)$$

$$\lambda_{z/t} = V_{z_0/t_0} + V_{x_0}f(\Theta_0), \quad (2.3.7d)$$

ahol felhasználtuk a következő függvényeket

$$f(\Theta) = \sum_{j=-1}^1 \left(-\frac{1}{2}\right)^{1+|j|} \frac{n_c \nu}{n_c + j} \sin\left(\frac{n_c + j}{n_c} \Theta \omega_L + \varphi_0\right), \quad (2.3.8a)$$

$$g(\Theta) = -\frac{c\nu^2}{2} \frac{n_c^2}{n_c^2 - 1} \sum_{j=1}^2 \left(-\frac{1}{4}\right)^j \cos\left(j \frac{\Theta \omega_L}{n_c}\right), \quad (2.3.8b)$$

$$h(\Theta) = \frac{c\nu^2}{32} \frac{3n_c^2 - 2}{n_c^2 - 1} \cos(2(\Theta \omega_L + \varphi_0)), \quad (2.3.8c)$$

valamint

$$l(\Theta) = \frac{c\nu^2}{4} \sum_{k=1}^2 \sum_{j=\{-1, 1\}} \left(-\frac{n_c}{4(n_c + j)}\right) \cos\left(\frac{2n_c + kj}{n_c} \Theta \omega_L + 2\varphi_0\right). \quad (2.3.8d)$$

A fentiekben bevezettük a

$$\nu = \frac{|e| E_0}{mc\omega_L \alpha} = \frac{a_0}{\alpha} \quad (2.3.9)$$

effektív dimenziótlan vektor potenciált, ami nem más, mint a szokásos dimenziótlan vektorpotenciál (a_0) osztva az elektron kezdeti sebességétől függő α mozgásállandóval. A (2.3.6a)-(2.3.6d) trajektóriákban az

$$\omega(\Theta) = - \int_{\Theta_0}^{\Theta} f(\Theta') d\Theta' \quad (2.3.10)$$

egy oszcilláló tag, amely az x -irányú komponensben, a c -vel történő szorzása miatt, a domináns járulékot adja. A klasszikus relativisztikus elektrodinamikából ismert, a klasszikus sugárnyomás következtében fellépő szisztematikus eltolódást a

$$\delta(\Theta) = - \int_{\Theta_0}^{\Theta} [g(\Theta') + h(\Theta') + l(\Theta')] d\Theta' \quad (2.3.11)$$

tag hordozza magában. Megjegyezzük, hogy mivel $f(\Theta)$, $g(\Theta)$, $h(\Theta)$ és $l(\Theta)$ függvények egyszerű trigonometrikus függvények lineáris kombinációjaként állnak elő, ezért ezek integráljai, azaz a $\omega(\Theta)$ és $\delta(\Theta)$ kifejezések könnyedén, explicit módon kiszámolhatók.

2.3.3. Kezdeti érték probléma tárgyalása

Felhívjuk az olvasó figyelmét, ahogyan tette Varró és Ehlotzky 1992-ben [83], hogy a trajektóriák kezdeti értékének megadásakor körültekintően kell eljárjunk. Ugyanis a (2.3.3a)-(2.3.3b) differenciálegyenlet megoldása során az idő mint para-

méter helyét a Θ hullám argumentum vette át. Ha folytonos lézertérrel feltételeznénk, ahogyan a korai publikációkban és a tankönyvi példákban, a kezdeti érték probléma változatlan maradna a Θ -ra történő áttérést követően is. De mivel a mi esetünkben lézerimpulzus Thomson-szórását vizsgáljuk, ahogyan a 2.3.1. ábra is mutatja, a kölcsönhatás kezdete és vége, a Θ_0 , illetve Θ_1 által meghatározott fényszerű hiperfelületeken történik. Azonban a laboratóriumi koordináta-rendszer, ahol igazából mérni tudjuk a megfelelő kezdeti értékeket, a $t = \text{konstans}$ által meghatározott térszerű hipersík. Ezáltal ahhoz, hogy a korábban látott megoldások jól használhatók legyenek, kapcsolatot kell keressünk a differenciálegyenlet kezdeti értékei és a laboratóriumi koordináta-rendszerben mérhető értékek között. Tegyük fel, hogy az elektron kezdeti pozícióját az $\mathbf{r}(t_0) = \{x_0, y_0, z_0\}$ helyvektorral adhatjuk meg. Olyan elrendezést vizsgálunk, ahol a részecske kezdetben $-z$ -irányba halad, egészen a Θ_0 -al jelölt kölcsönhatási tartományig. Így először arra keressük a választ, hogy a

$$ct = c\Theta_0 + z \quad \text{és} \quad ct = \frac{c\Delta t}{v_z(t_0)\Delta t} (z - z_0) \quad (2.3.12)$$

képlettel leírt egyenesek milyen koordináta értékeknél metszik egymást. Itt Δt a laboratóriumi t_0 és a kölcsönhatás kezdőpillanata között eltelt időt jelöli, míg $v_z(t_0)$ a részecske z -irányú sebessége a t_0 időpillanatban. Megoldva a fenti egyenletet megkapjuk a keresett transzformációs összefüggéseket,

$$z(\Theta_0) = \frac{z_0 + v_z(t_0)\Theta_0}{1 + \frac{|v_z(t_0)|}{c}}, \quad (2.3.13a)$$

$$ct(\Theta_0) = \frac{z_0 + c\Theta_0}{1 + \frac{|v_z(t_0)|}{c}}. \quad (2.3.13b)$$

Ezeket felhasználva a lézerimpulzus polarizációs irányára merőleges komponensek is megkaphatók.

$$\mathbf{r}_\perp(\Theta_0) = \mathbf{r}_\perp(t_0) + \frac{\mathbf{v}_\perp(t_0)}{c} \frac{z_0 + c\Theta_0}{1 + \frac{|v_z(t_0)|}{c}}. \quad (2.3.14)$$

Szükségünk van még a Θ paraméter szerinti kezdeti „sebességekre”, amelyeket az előbbi kezdeti koordináták Θ_0 szerinti deriváltjaként kaphatjuk meg.

$$u^0(\Theta_0) = \frac{c}{1 + \frac{|v_z(t_0)|}{c}}, \quad (2.3.15a)$$

$$\mathbf{u}(\Theta_0) = \frac{\mathbf{v}(t_0)}{1 + \frac{|v_z(t_0)|}{c}}. \quad (2.3.15b)$$

Az itt tárgyalt kezdeti értékre vonatkozó transzformációs szabályokat természetesen hasonló gondolatmenet alapján más geometriai elrendezésre is alkalmazni

lehet.

2.4. Kisugárzott mező spektrális eloszlása és időbeli alakja

2.4.1. Egyetlen elektron által kisugárzott mező

A (2.3.6a)-(2.3.6d) trajektóriát felhasználva ki tudjuk számolni egyetlen, klasszikus elektron által kisugárzott mező spektrális eloszlását az (1.1.11) képlet alapján. Megjegyezzük, hogy Chen és szerzőtársai a [84] publikációban rámutattak arra, hogy, a tankönyvi, folytonos lézertérre bemutatott, példától eltérően, lézerimpulzus alkalmazása esetén az (1.1.11) gyorsulást is tartalmazó képletet indokolt használni. Illetve, amennyiben kihasználjuk a

$$\frac{\mathbf{n} \times [(\mathbf{n} - \boldsymbol{\beta}) \times \dot{\boldsymbol{\beta}}]}{(1 - \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\beta})^2} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta})}{1 - \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\beta}} \right) \quad (2.4.1)$$

összefüggést, az (1.1.11) képlet parciálisan integrálható, amelynek eredménye az alábbi,

$$\mathbf{E}(\omega) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 c} \frac{e^{i\omega R_0}}{R_0} \left(\left[\frac{\mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta})}{1 - \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\beta}} e^{i\omega(t - \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}}{c})} \right]_{t_0}^{t_1} - i\omega \int_{t_0}^{t_1} \mathbf{n} \times (\mathbf{n} \times \boldsymbol{\beta}) e^{i\omega(t - \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}}{c})} dt \right). \quad (2.4.2)$$

Itt $\mathbf{n} = \{\cos(\varphi) \sin(\vartheta), \sin(\varphi) \sin(\vartheta), \cos(\vartheta)\}$ a megfigyelési pontba mutató helyvektor gömbi koordináta-rendszerben kifejezve. Azonban a lézerimpulzus t_0 kezdeti és t_1 végpontjában kiértékelt tagok nem hanyagolhatók el, és bizonyos paramétertartományban jelentős járulékot adnak a kiszámított mező spektrális eloszlásához, főként a nagyfrekvenciás tartományban.

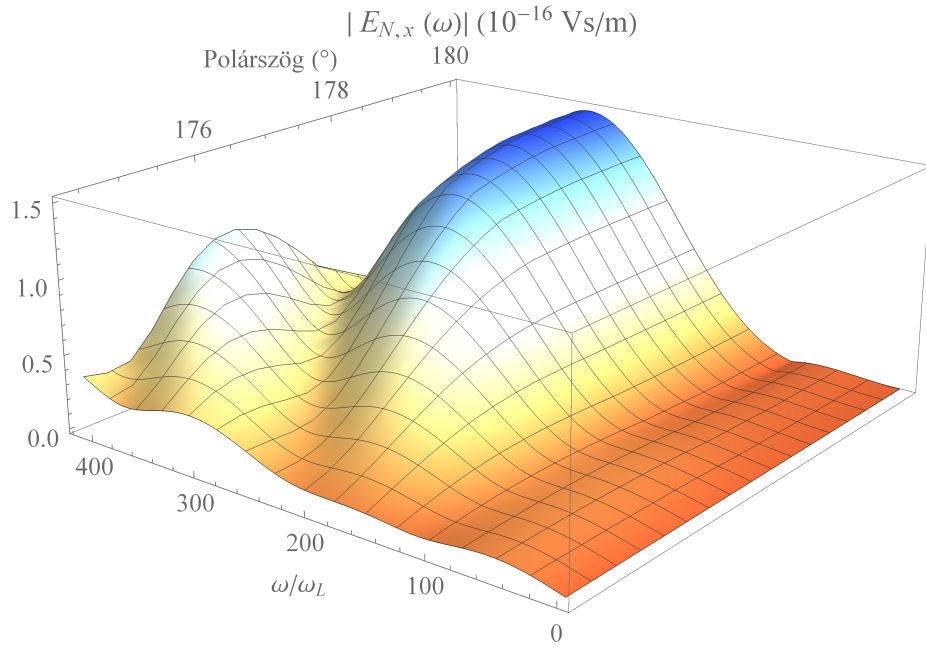
Ahhoz, hogy a (2.3.6a)-(2.3.6d) trajektóriát közvetlenül tudjuk használni, a fenti képletben át kell térjünk t idő szerinti integrálról Θ hullámargumentum szerinti integrálra, az alábbiak szerint.

$$\frac{d\mathbf{r}}{d\Theta} \frac{d\Theta}{dt} = \mathbf{u}(\Theta) \frac{d\Theta}{dt}, \quad (2.4.3a)$$

illetve

$$\frac{1}{c} \frac{d\Theta}{dt} = \frac{d\Theta}{d(ct)} = \left(\frac{d(ct)}{d\Theta} \right)^{-1} = u^0(\Theta)^{-1}. \quad (2.4.3b)$$

Ekkor a számunkra megfelelő formula, amelyben Θ hullámargumentum szerinti



2.4.1. ábra. Egyetlen elektron által kisugárzott tér spektrális amplitúdójának polárszög szerinti eloszlása a visszaszórás (180°) iránya körüli kis polárszög tartományban. Az elektron, valamint a lézertér paraméterei: $\gamma_0 = 10$, $n_c = 3$, $E_0 = 4 \cdot 10^{12}$ V/m, $\lambda_L = 800$ nm, $\varphi_0 = 0$ és $R_0 = 2$ m.

integrál szerepel,

$$\mathbf{E}(\omega) = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 c} \frac{e^{i\frac{\omega}{c}R_0}}{R_0} \left(\left[\frac{\mathbf{n} \times \left(\mathbf{n} \times \frac{\mathbf{u}(\Theta)}{u^0(\Theta)} \right)}{1 - \mathbf{n} \cdot \frac{\mathbf{u}(\Theta)}{u^0(\Theta)}} e^{i\omega(t(\Theta) - \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}(\Theta)}{c})} \right]_{\Theta_0}^{\Theta_1} - i\omega \int_{\Theta_0}^{\Theta_1} \mathbf{n} \times \left(\mathbf{n} \times \frac{\mathbf{u}(\Theta)}{c} \right) e^{i\omega(t(\Theta) - \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}(\Theta)}{c})} d\Theta \right), \quad (2.4.4)$$

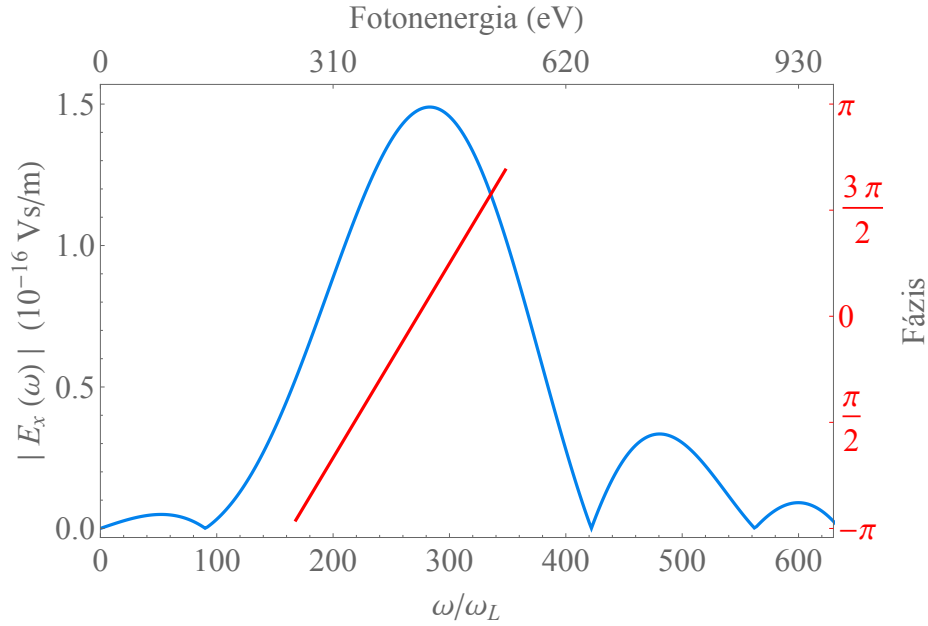
ahol

$$\mathbf{u}(\Theta) = \frac{d\mathbf{r}}{d\Theta}, \quad \text{és} \quad u^0(\Theta) = \frac{d(ct)}{d\Theta}, \quad (2.4.5)$$

a trajektória Θ hullámargumentum szerinti általánosított „sebessége”.

A továbbiakban specializáljuk a (2.3.1) képlettel leírt lézertér impulzust az következők szerint. Legyen a Thomson-szórásban résztvevő lézertér háromciklusú, azaz $n_c = 3$, ami egyébként félértékszélességben alig több, mint egy ciklust jelent. A lézertér központi hullámhosszának válasszuk a titán-zafír oszcillátorhoz tartozó $\lambda_L = 800$ nm-t, illetve a maximális térerőssége legyen az $a_0 = 1$ dimenziótlan vektorpotenciál értékhez tartozó kb. $4 \cdot 10^{12}$ V/m elektromos térerősség érték, ami $2,16 \cdot 10^{18}$ W/cm² csúcshintérségnek felel meg. Valamint most tekintsünk el a vivő-burkoló fáziskülönbségtől, tehát $\varphi_0 = 0$.

A 2.4.1. ábrán a korábban említett paraméterekkel a (2.3.6a)-(2.3.6d) trajektórián mozgó kezdetben $\gamma_0 = 10$ Lorentz-faktorhoz tartozó, $v_0 = 0,995 \cdot c$ sebes-



2.4.2. ábra. Egyetlen elektron által kisugárzott tér spektrális eloszlása a visszaszórás irányában (kék görbe), valamint a fázisa fő spektrális csúcs alatt (piros görbe). Az alkalmazott paraméterek megegyeznek a 2.4.1. ábráéval.

séggel rendelkező elektron által kisugározott mező spektrális eloszlása látható a kölcsönhatási tartománytól $R_0 = 2$ m távolságban lévő megfigyelési pontban. Az ábrázolt polárszög tartomány megegyezik az elektron kezdeti sebességének iránya körüli $1/\gamma_0$ -al, ami a szokásos tankönyvi példákban, a folytonos elektromágneses síkhullám és elektron Thomson-szórásakor, a szórt sugárzás divergenciája. Látható, hogy az alkalmazott rövid lézimpulzus hatására, a szórt sugárzás sokkal érzékenyebb a polárszög változására, mint hosszú impulzus esetén. Továbbá a szóródó lézimpulzus néhány ciklusos tulajdonsága a relativisztikus effektusokon felüli spektrális kiszélesedést okoz a szórt sugárzás spektrumában. Az eddigieken felül megvizsgálva a 2.4.2. ábrát, láthatjuk, hogy az első spektrális csúcs elég széles, és ebben a frekvencia tartományban a fázis elég sima ahhoz, hogy időtartományban egy rövid fényimpulzust kapjunk. Azonban az itt megvizsgált spektrum csupán egyetlen elektrontól származik, így makroszkopikus fényimpulzus szintetizálására nem alkalmas, így a következő részben azt vesszük górcső alá, hogy nagyszámú elektron együttesen ún. elektroncsomagként képes-e makroszkopikusan mérhető és felhasználható fényimpulzust kisugározni Thomson-szórás révén.

2.4.2. Ideális elektroncsomag tárgyalása; a koherencia tényező

Az előzőekben láttuk alapján, azt szeretnénk tanulmányozni, hogy vajon egy megfelelően preparált elektroncsomagon történő Thomson-szórás során hasonlóan jó tulajdonságú, makroszkopikusan mérhető sugárzást kapunk-e. Illetve arra is keressük a választ, hogy a „megfelelően preparált” elektroncsomag, milyen paramétertartományt jelent.

Általános esetben nagyszámú elektron együttes egzakt tárgyalása numerikusan nehéz, erőforrás-igényes feladat, analitikusan pedig közel lehetetlen vállalkozás. Éppen ezért ezekben az esetekben általában valamilyen, a vizsgált problémához illeszkedő közelítéssel élünk. Nagyszámú töltött részecske együttes modellezésére kifejlesztett, hatékony numerikus eljárás az 1.1. szakaszban is tárgyalt PIC szimuláció, amelynek azonban megvannak a maga hátrányai. Az analitikus módszerek közé tartozik a valamilyen módon átlagolt tér, illetve töltéssűrűség a sok-részecske rendszerek dinamikájának leírására [56], vagy nagyon gyakran, ahogyan mi is tesszük, az elektroncsomag bizonyos szempontból ideálisan történő kezelése.

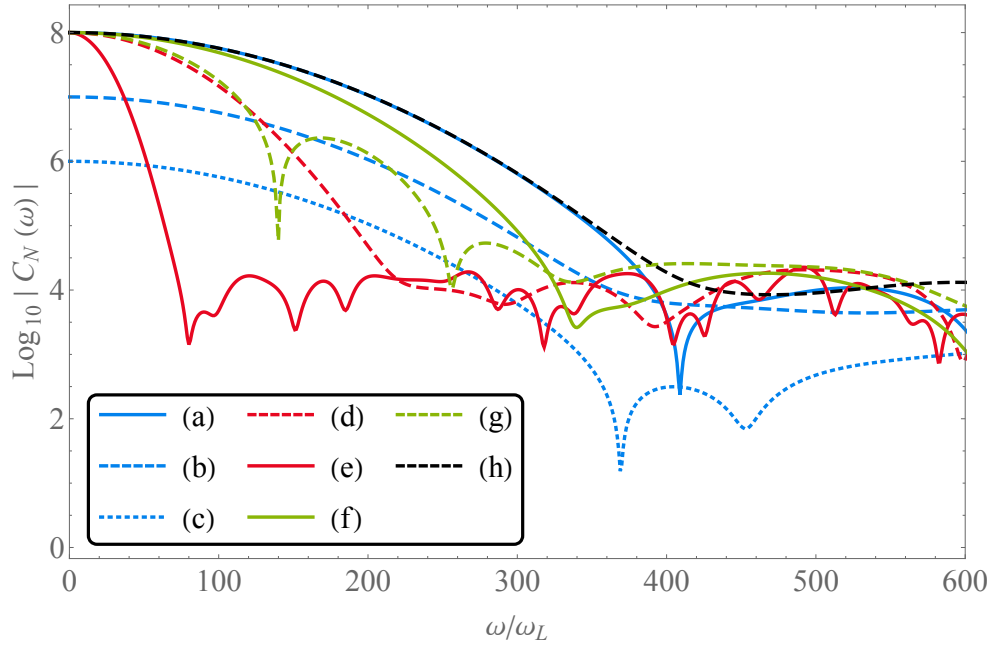
Tegyük fel, hogy a vizsgált elektronok egymással történő kölcsönhatása az intenzív lézertérben való mozgásuk során elhanyagolható, illetve az elektronok kezdeti sebességvektora megegyezik, azaz azonos nagyságú és egy irányba mutat, vagyis az elektroncsomag monoenergetikus. Ekkor jobban szemügyre véve a (2.4.4) képletet, látható, hogy az elektron kezdeti koordinátái csupán az exponenciális függvényben találhatók meg, így ezeket a szorzótényezőként ki tudjuk emelni a integrálás elé. Továbbá, mivel a kölcsönhatási tartománytól távoli megfigyelési pontban az idealizált elektroncsomagtól származó sugárzást az elemi emitterekről származó sugárzás vektori összegeként tudjuk kiszámolni, bevezethetjük az ún. koherencia tényezőt [83, 85],

$$C_N(\omega) = \sum_{k=1}^N \exp \left[i\omega \left(t_k(\Theta_0) - \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}_k(\Theta)}{c} \right) \right], \quad (2.4.6)$$

amelyben k index jelöli a különböző elektronokat, így ezzel figyelembe vesszük az elektronok eltérő kezdeti pozícióját. A koherencia tényezővel az N számú elektron által kisugárzott mező spektruma az alábbi módon számolható,

$$\mathbf{E}_N(\omega) = C_N(\omega) \mathbf{E}(\omega). \quad (2.4.7)$$

A 2.1 szakaszban is említett elemi hullámoptikai elvek alapján, ahhoz hogy a 2.4.1. ábrán látható spektrum első, széles spektrális csúcsának számottevő ré-



2.4.3. ábra. A koherencia tényező abszolút értékének spektrális eloszlása néhány gyakorlati esetben. Az alkalmazott paraméterek az (a) görbe esetén: $N = 10^8$, $\gamma_0 = 10$, $\vartheta = 180^\circ$, $L_e = 2,66$ nm. A többi görbe esetén változtatott paraméterek az (a)-hoz képest: (b): $N = 10^7$; (c) $N = 10^6$; (d) $L_e = 5$ nm; (e) $L_e = 15$ nm; (f) $\vartheta = 179,9^\circ$; (g) $\vartheta = 179,8^\circ$; (h) $\gamma_0 = 15$.

sze megjelenjen az N -elektron spektrumában, nanométer nagyságrendű longitudinális méretű vagy időtartományban attoszekundum hosszúságú relativisztikus elektroncsomag szükséges. A 2.4.3. ábrán bemutatjuk, hogy egy bizonyos paramétertartományban hogyan változik a (2.4.6) koherencia tényező abszolút értéke logaritmikus skálán ábrázolva. Az (a) görbéhez tartozó viszonyítási paraméterek esetén mind a koherencia tényező nagysága, mind a fázisa kb. $400 \cdot \omega_L$ frekvenciáig független az egyes elektronok kezdeti koordinátáitól. Ezen frekvencia felett már a különböző, véletlenszerű, numerikus realizációkként eltérő alakú, az adott eloszlásra jellemző oszcillációt tartalmaznak, azonban, mint később látni fogjuk, ez nem befolyásolja a kollektív sugárzást, mivel itt a koherencia tényező nagysága már elhanyagolható az alacsonyabb frekvenciájú tartományhoz képest. A jobb összevethetőség érdekében a többi görbén mindig csak egyetlen paramétert változtatunk meg. Összehasonlítva az (a), (b) és (c) görbéket látható, hogy a koherencia tényező nagysága lineárisan függ az N elektronszámtól, ami előrevetíti a szuperradiáns kollektív sugárzás létrehozásának lehetőségét. Megvizsgálva az (a), (d) és (e) görbéket megállapíthatjuk, amit a következő bekezdésben explicit képlettel is látni fogunk, hogy a konstruktív interferencia frekvenciatartománya fordítottan arányos az elektroncsomag longitudinális méretével. Hasonló hatása van a (f) és (g) görbéken látható kicsiny polárszög változásnak a visszaszórás irányához képest. Azonban az (a) és (f) görbék összevetése azt mutatja, hogy a

koherencia tényező kevésbé érzékeny az elektroncsomag kezdeti energiáját jellemző Lorentz-faktor γ_0 változására, ezt szintén látni fogjuk a következő bekezdésben.

A (2.4.6) koherencia tényezőt alapul véve könnyedén származtathatunk a elektron nano-csomag Thomson-szórása során létrejövő konstruktív interferencia levágási frekvenciájára egy közelítő összefüggést. Nézzük a koherencia tényezőt visszaszórás irányában, azaz legyen $\mathbf{n} = \{0, 0, -1\}$, és használjuk fel a (2.3.13a) és (2.3.13b) kezdeti koordinátákra vonatkozó transzformációs összefüggéseket $\Theta_0 = 0$ esetén. Tegyük fel továbbá, hogy az elektronok z -irányú távolsága megegyezik az elektroncsomagon belül, ekkor ez a távolság

$$\bar{z} = \frac{L_e}{N}, \quad (2.4.8)$$

ahol L_e az elektroncsomag hossza. Ekkor a (2.4.6) egyenlet az alábbi alakot ölti,

$$C_N(\omega) = \sum_{k=0}^{N-1} \left(\exp \left[i \frac{\omega}{c} \frac{2}{1 + \sqrt{1 - 1/\gamma_0^2}} \frac{L_e}{N-1} \right] \right)^k \quad (2.4.9)$$

ahol kihasználtuk az elektronok kezdeti sebessége és Lorentz-faktora közötti

$$|v_z(t_0)| = c \sqrt{1 - 1/\gamma_0^2} \quad (2.4.10)$$

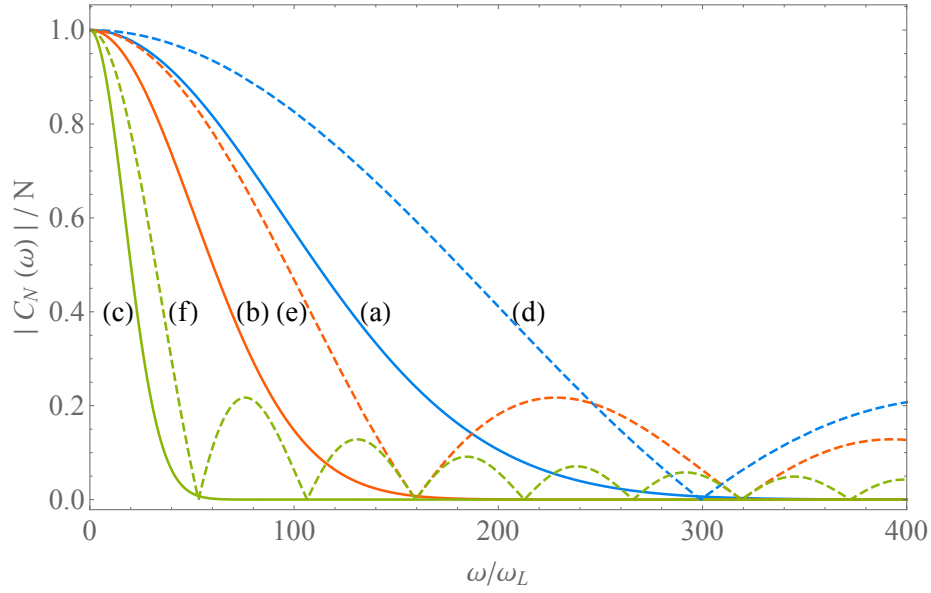
összefüggést. Felhasználva a jól ismert exponenciális összegképletet a koherencia tényező abszolút értékére az alábbi adódik.

$$|C_N(\omega)| = \left| \frac{\sin \left(\frac{\omega}{c} \frac{1}{1 + \sqrt{1 - 1/\gamma_0^2}} \frac{L_e}{N-1} N \right)}{\sin \left(\frac{\omega}{c} \frac{1}{1 + \sqrt{1 - 1/\gamma_0^2}} \frac{L_e}{N-1} \right)} \right| \quad (2.4.11)$$

Esetünkben nagy sűrűségű elektron nano-csomagot tételezünk fel, azaz $N \gg 1$ és $L_e \ll \lambda_L$, így a (2.4.11) képletben a nevezőben lévő szinusz függvény az argumentumával közelíthető, így $|C_N(\omega)|$ első zérushelyére a következő összefüggést kapjuk.

$$\omega_c = c \left(1 + \sqrt{1 - 1/\gamma_0^2} \right) \frac{\pi}{L_e}. \quad (2.4.12)$$

A 2.4.4. ábrán folytonos vonallal látható a (2.4.6) koherencia tényező N elektronszámmal normált abszolút értékének néhány numerikus realizációja a szóba jöhető paramétertartományban, valamint a megfelelő színű szaggatott vonallal az adott paraméterhez tartozó (2.4.11) közelítő formula. A 2.4.4. ábrán látható görbék esetén az elektronszám állandó, és különböző elektroncsomag hosszúság esetén, amely alatt az alkalmazott Gauss-eloszlás félértékszélességét értjük, ábrázoltuk a koherencia tényező abszolút-értékét. A (2.4.11) egyenközü beosztás



2.4.4. ábra. Az elektronszámmal normalizált koherencia tényező abszolút értékének frekvencia függése a visszaszórás irányában. Az (a)-(c) görbék realiztikus, sztochasztikus kezdeti elektron pozícióval rendelkező nano-csomagokhoz tartoznak, míg a (d)-(f) görbék olyan elektron nano-csomagra vonatkoznak, amelyben az elektronok egyenlő távolságra vannak egymástól. A zöld, narancssárga és kék görbék paraméterei rendre megegyeznek a 2.4.3. ábra (a), (d) és (e) görbéivel.

esetén az elektroncsomag hosszúsága (L_e) szintén megegyezik realiztikus csomag longitudinális Gauss-eloszlásának a félértékszélességével. Láthatjuk, hogy a (2.4.6) képlettel leírt realiztikusabb elektroncsomaghoz tartozó koherencia tényező gyorsabban levág, mint a valóságtól jóval elrugaskodottabb egyenközü beosztással rendelkező elektroncsomag esetén, és természetesen a nagyfrekvenciás csúcsok sem szerepelnek benne. Azonban azt is észrevehetjük, hogy a (2.4.12) egyenlettel megadott zérushely jól közelíti az ideális, sztochasztikus kezdeti pozícióval rendelkező elektroncsomag levágási frekvenciáját. Vagy megfordítva a gondolatmenetet, a (2.4.12) összefüggés segítségével a kívánt levágási frekvenciához meg tudjuk határozni az elektroncsomag szükséges paramétereit. A fenti gondolatmenet és a (2.4.12) összefüggés alapján mondhatjuk, hogy az elektroncsomag longitudinális mérete (L_e) az egyik legfontosabb paraméter a konstruktív interferencia spektrális tartománya szempontjából, míg a kezdeti Lorentz-faktor (γ_0) jóval kevésbé befolyásolja a levágási frekvenciát.

2.4.3. Elektron nano-csomag sugárzási tere

Használjuk fel tehát a (2.4.12) levágási frekvenciára vonatkozó képletet, valamint az egyetlen elektrontól származó 2.4.1. ábrán látható spektrumot, amivel megerősíthetjük azt a korábbi hullámoptikán alapuló következtetést, hogy nagyjából $300 \cdot \omega_L$ körfrekvenciáig tartó konstruktív interferenciához, egy olyan nem köl-

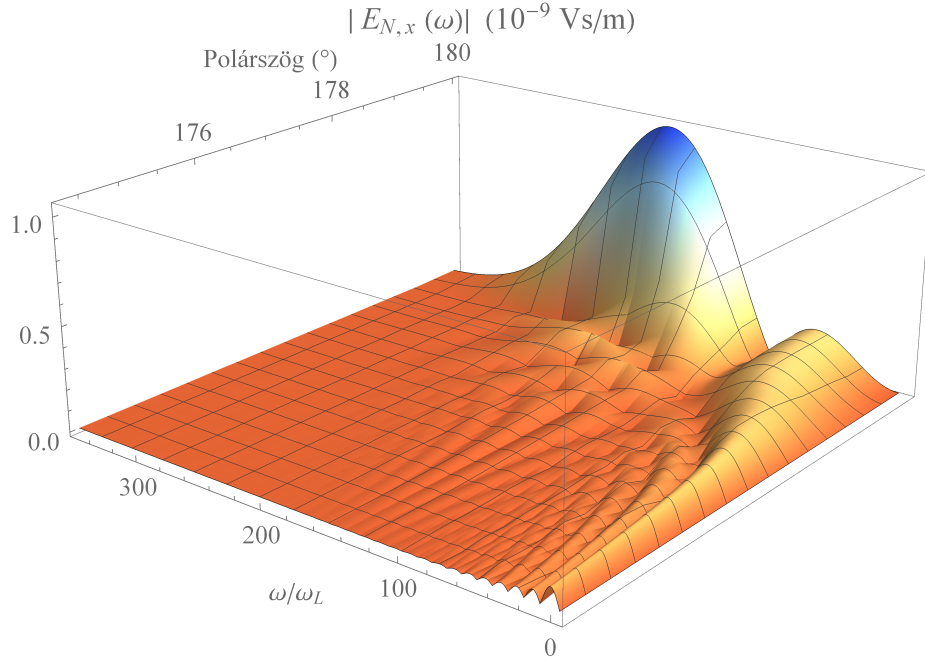
csönható, monoenergetikus elektroncsomagot kell feltételeznünk, aminek a hossza 2,66 nm. Ezeket attoszekundumos elektroncsomagoknak vagy más néven elektron nano-csomagoknak szokás nevezni.

Mi a továbbiakban egy olyan elektroncsomagot fogunk feltételezni, ami $N = 10^8$ db elektront tartalmaz, a kezdeti energiája 5,2 MeV, ami a $\gamma_0 = 10$ kezdeti Lorentz-faktorhoz tartozik, longitudinális irányban Gauss-eloszlású 2,66 nm félértékszélességgel, és transzverzálisan 800 nm, azaz a szóródó lézertér központi hullámhosszával megegyező átmérőjű, egyenletes eloszlással rendelkezik. A 2.1. szakaszban bemutatott, úttörő elméleti és kísérleti eredmények és más előremutató szimulációk [86, 87, 88] jelzik azt, hogy ezek a paraméterek bár napjainkban még nem, a közeljövőben minden bizonnyal kísérletileg is elérhetőek lesznek.

A feltételezett paraméterek lehetővé teszik számunkra, hogy a számítások során az elektronokat ideális elektroncsomagként kezeljük. Ugyanis tankönyvi példák [13, 12], és publikáció [85] alapján is elhanyagolhatjuk a sugárzási visszahatást, hiszen ezen folyamat következtében fellépő energiavesztés karakterisztikus ideje 5 nagyságrenddel nagyobb, mint a lézertér és az elektronok kölcsönhatásának időtartama. Az alapján, hogy a feltételezett paraméterű elektroncsomagban a Coulomb-erő az elektronok között 3 nagyságrenddel kisebb, mint a korábban is alkalmazott lézertér csúcstélerőssége által kifejtett Lorentz-erő, az elektronok közötti kölcsönhatástól szintén eltekinthetünk. Amennyiben az alkalmazott elektroncsomag kezdeti energiájának szórása nem haladja meg az 0,1 %-ot, az eredményeink kvantitatíve érvényben maradnak. Mivel a trajektóriákban, így a spektrum számolásakor is a longitudinális sebesség komponens a legmeghatározóbb, valamint a visszaszórt sugárzást vizsgáljuk, tehát közel vagyunk a koordináta-rendszerünk z -tengelyéhez, így transzverzális irányú sebesség szórás nem befolyásolja a bemutatásra kerülő eredményeket.

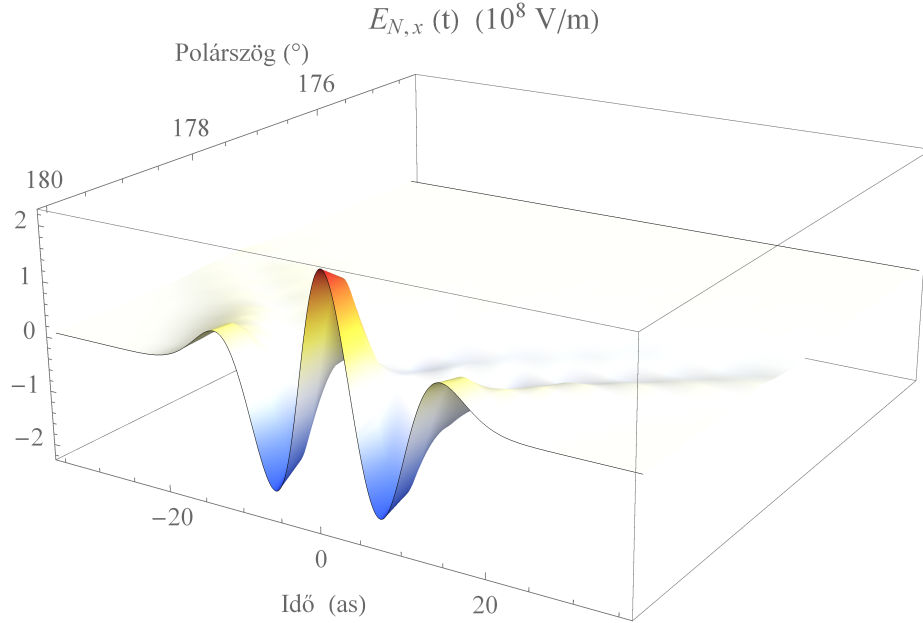
A 2.4.5. ábrán láthatjuk a fent említett elektroncsomag paraméterek esetén a kollektív sugárzás spektrális amplitúdójának polárszög függését a 2.4.1. ábrán is használt $1/\gamma_0$ radián polárszög tartományon. Összehasonlítva a 2.4.1. és 2.4.5. ábrát láthatjuk, hogy a sugárzás kollektív természete jóval keskenyebb sugárzási kúpot okoz, aminek egyértelműen az az oka, hogy a koherencia tényező rendkívül érzékenyen függ a polárszögtől. A spektrumokból az is látható, hogy akár az egyetlen elektrontól, akár az elektroncsomagtól származó sugárzás jelentős része beleesik a biológiai kísérletek szempontjából fontos 2,33-4,37 nm, vagyis 283,7-532,1 eV spektrális tartományban lévő víz ablakba, ami további felhasználási lehetőséget kínálhat, például a vízkörnyezetben lévő szerves molekulák kísérleti vizsgálatában [89].

Elvégezve a (2.4.7) kollektív spektrum inverz Fourier-transzformációját, megkapjuk a visszaszórt sugárzás időbeli alakját, amelynek domináns x -komponensének



2.4.5. ábra. A elektron nano-csomag által kisugárzott tér spektrális amplitúdójának polárszög függése. Az alkalmazott paraméterek megegyeznek a 2.4.1. ábra, valamint a 2.4.3. ábra (a) görbéjének paramétereivel.

polárszög függését a 2.4.6. ábrán láthatjuk. Az így kapott attoszekundumos fényimpulzus csupán két és fél optikai ciklust tartalmaz, a félértékszélessége 16 as. A kölcsönhatási tartománytól 2 méter távolságra lévő megfigyelési pontban a csúcshintenzitása $6,21 \cdot 10^9 \text{ W/cm}^2$ és az átlagos intenzitása $1,31 \cdot 10^9 \text{ W/cm}^2$, ami átszámítva 99 nJ impulzusenergiát jelent. A visszaszórt sugárzás polarizációját tekintve a szóródó lézerimpulzus eredeti polarizációs iránya a domináns. Azonban a szórt sugárzásnak van az x -komponenssel fázisban lévő, terjedés irányú, azaz z -komponense is, ami viszont három nagyságrenddel kisebb, mint az x -komponens. Továbbá, nullától különböző azimutaszögekre megjelenik a sugárzás y -komponense is, aminek bár hasonló a nagyságrendje, mint a z -komponensnek, nincs fázisban a domináns komponenssel, így az x -komponens zéróhelyei körül a polarizációs viszonyok nem triviálisak. Azonban egy kísérleti elrendezésben ez könnyen kiküszöbölhető különböző optikai elemek segítségével, így tökéletesen lineárisan polarizált attoszekundumos fényimpulzust kaphatunk. Megjegyezzük, hogy a Thomson-szórás során a visszaszórt sugárzás domináns komponense megőrzi elektronsomag kezdeti eloszlásának szimmetriáját, azaz a kapott sugárzás x -komponense azimutálisan szimmetrikus.



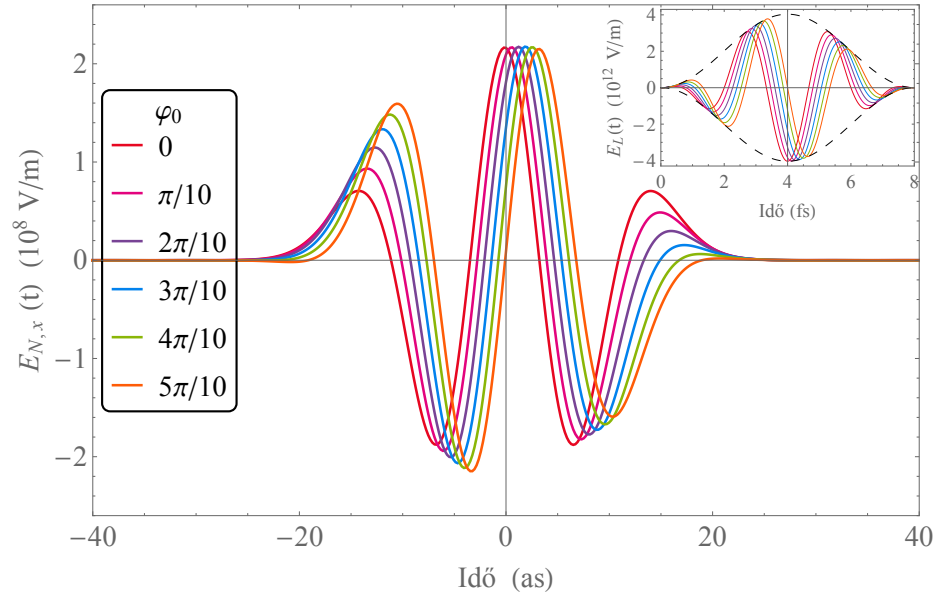
2.4.6. ábra. Elektron nano-csomag által kisugárzott izolált attoszekundumos fényimpulzus idő- és térbeli alakja, amit a 2.4.7. ábrán látható spektrális amplitúdó és a hozzátartozó fázis alapján inverz Fourier-transzformációval számoltunk ki. Megjegyezzük, hogy a fényimpulzus azimutálisan szimmetrikus.

2.5. Az attoszekundumos fényimpulzus tulajdonságai

2.5.1. A vivő-burkoló fáziskülönbség kontrollálhatósága

Az ultrarövid, néhány optikai ciklust tartalmazó fényimpulzusok egyik legfontosabb paramétere a vivő-burkoló fáziskülönbség. Ez az a paraméter, melynek stabilitása és kontrollálhatósága elengedhetetlen az attoszekundumos időfelbontású pumpa-próba kísérleteknél, így a legmodernebb lézerberendezések esetén már megkövetelt tulajdonság a vivő-burkoló fáziskülönbség stabilitása. Jól tudjuk, hogy az atomi és molekuláris rendszerekben lezajló folyamatok időbeliségének kísérleti tanulmányozásakor az infravörös lézerimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbségének lényeges hatása van [90, 7, 91], azonban az utóbbi évtizedben azt is bebizonyították, hogy ugyancsak alapvető fontosságú az attoszekundumos fényimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbségének kontrollálhatósága a pumpa-próba kísérletek során [92, 93]. Ezzel kapcsolatban Hebling és csoportja publikált egy újszerű módszert, ahol mágneses undulátorok segítségével képesek lehetünk kontrollálni az attoszekundumos fényimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbségét [94].

Vizsgáljuk meg, hogy a korábban látott eredmények, hogyan változnak akkor, ha a (2.3.1) képletben a φ_0 -al jelölt vivő-burkoló fáziskülönbséget változtatjuk. A 2.5.1. ábrán látható, hogy a korábban használt lézertér és elektronsomag



2.5.1. ábra. Az attoszekundumos fényimpulzus időbeli alakja a visszaszórás irányában, a bejövő lézertimpulzus különböző vivő-burkoló fáziskülönbség értékei esetén. A betétben megfelelő színekkel a bejövő lézertimpulzus időbeli alakját ábrázoltuk. A lézertér egyéb paraméterei megegyeznek a 2.4.1. ábráéval, az elektroncsomag paraméterei megfelelnek a 2.4.3. ábra (a) görbéjének paramétereivel.

paraméterek esetén a visszaszórás irányában hogyan változik a sugárzás időbeli alakja, amikor változtatjuk a bejövő lézertimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbségét. Jól látható, hogy a bejövő lézertér és a kisugárzott attoszekundumos fényimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbségei között egyértelmű lineáris kapcsolat van: a Thomson-szórás eredményeként kapott fényimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbsége π fáziskülönbséggel tökéletesen követi a szóródó, infravörös lézertimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbségét. Ez pedig lehetővé teszi a vivő-burkoló fáziskülönbség dinamikusan történő kontrollálhatóságát. Például olyan módon, hogy ha az itt tárgyalt Thomson-szórással a infravörös, próba lézertimpulzussal hozzuk létre az attoszekundumos, pumpa fényimpulzust, akkor a kísérletek során biztosak lehetünk abban, hogy π fáziskülönbséggel megegyezik a két impulzus vivő-burkoló fáziskülönbsége, ami a pumpa-próba kísérletek további pontosításához járulhat hozzá.

2.5.2. A bejövő lézertimpulzus intenzitásának hatása

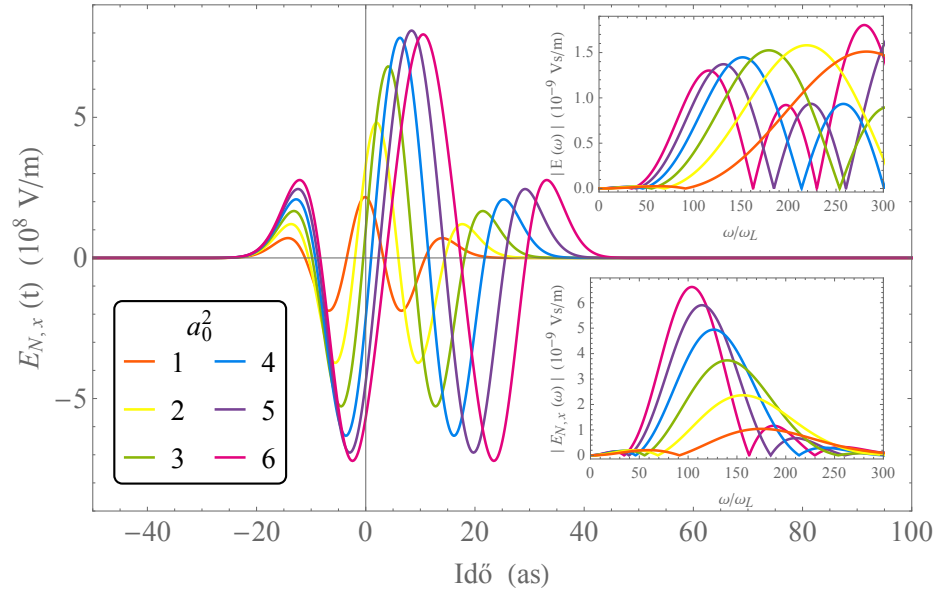
A kísérleti felhasználhatóság szempontjából másik nagyon fontos tulajdonság az attoszekundumos fényimpulzus intenzitása. A manapság mindennapi laboratóriumi rutinként nemesgáz mintákon történő magasharmonikus-keltés segítségével előállított attoszekundumos fényimpulzusok egyik nagy hátránya, hogy limitált az általuk elérhető maximális intenzitás a fényimpulzus keltés módja miatt. Éppen

ez adja az egyik motivációnkat arra, hogy tanulmányozzuk a Thomson-szórást, mint lehetséges alternatív megoldást attoszekundumos fényimpulzusok előállítására, ahol fizikai folyamatok nem, vagy nem ilyen mértékben korlátozzák az attoszekundumos fényimpulzusok elérhető intenzitását.

A 2.5.2. ábrán bemutatjuk, hogyan változik az visszaszórt attoszekundumos fényimpulzus intenzitása a visszaszórás irányában, miközben változtatjuk a szóródó infravörös lézerimpulzus csúcsintenzitását $2,16 \cdot 10^{18} - 1,3 \cdot 10^{19} \text{ W/cm}^2$ tartományon, ami megegyezik a dimenziótlan vektorpotenciál négyzetének (a_0^2) 1-6 értékével. Összehasonlítva a narancssárga és a zöld görbét láthatjuk, hogy míg a bejövő lézerimpulzus csúcsintenzitását megtriplázzuk, ugyanis az a_0^2 áll egyenes arányban a lézerintenzitással, addig az attoszekundumos fényimpulzus csúcstérerőssége háromszorozódik meg. Tehát a csúcsintenzitás az

$$I_0 \sim |E_0|^2 \quad (2.5.1)$$

összefüggés értelmében megkilencszereződik, miközben a fényimpulzus hossza jelentős mértékben nem növekszik. Így a tárgyalt paraméterek esetén a Thomson-szórás ilyen értelemben nemlineáris jeleget mutat. A bejövő intenzitás további növelése azonban már nem okozza a visszaszórt sugárzás intenzitásának ilyen mértékű növekedését. Sőt, egy „telítési” intenzitás jellegű határérték után már egyáltalán nem látunk intenzitás növekedést, csupán az impulzushossz nyúlik meg. Ennek oka az egyetlen elektron sugárzása, illetve a kollektív sugárzást jellemző koherencia tényező eltérő intenzitásfüggésében keresendő. Míg a (2.4.6) koherencia tényező a lézerintenzitástól nem, csupán az elektroncsomag paramétereitől függ, addig a (2.4.4) egyetlen elektron sugárzásának spektrális eloszlását az elektron trajektóriáján keresztül jelentősen befolyásolja a szóródó lézerimpulzus intenzitása. Ezt láthatjuk a 2.5.2. ábrán a felső betéten. Ahogy növeljük az intenzitást, a spektrális csúcsok egyre szűkülnek, valamint szisztematikusan eltolódnak az alacsonyabb frekvenciák felé. Mivel a dimenziótlan vektorpotenciál az elektron mozgásának relativisztikus, nemlineáris voltát jellemzi, a kisugárzott tér spektrális intenzitásának egyre nagyobb része a magasabb frekvenciák tartományba esik, így az első, a lineáris Thomson-szóráshoz tartozó spektrális csúcs amplitúdója fokozatosan csökken. Így világossá válik számunkra, hogy a bejövő lézerimpulzus intenzitásának növelése azért okozza az attoszekundumos fényimpulzus hosszának növekedését, mert az első spektrális csúcs beszűkül. Azonban, mivel a koherencia faktor csupán az elektroncsomag paraméteritől függ, adott tulajdonságú elektroncsomaghoz adott levágási frekvencia is tartozik, így ahogyan a 2.5.2. ábrán az alsó betéten is látszik, a kollektív sugárzás spektrumában az egyetlen elektron spektrumából leginkább a lineáris spektrális csúcs jelenik

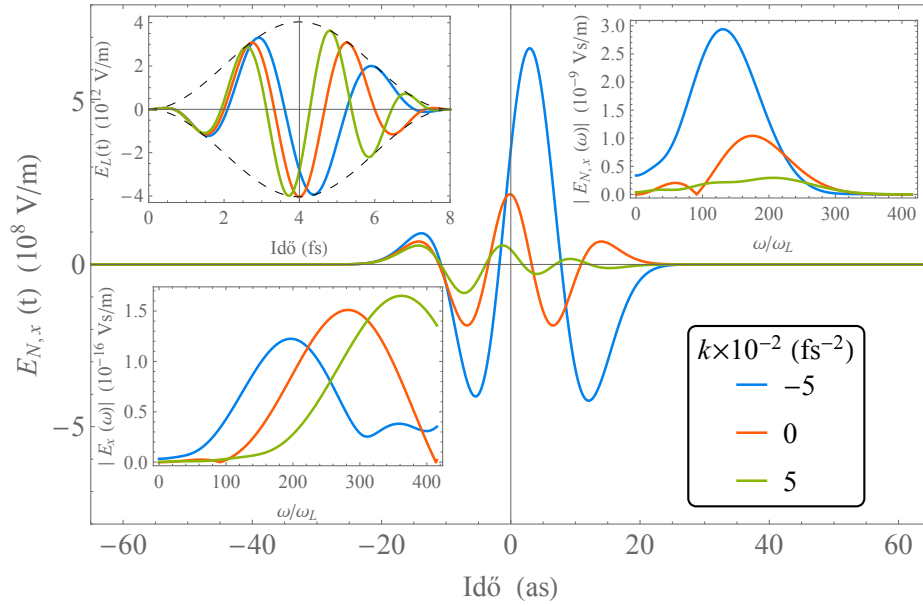


2.5.2. ábra. Az attoszekundumos fényimpulzus időbeli alakja a visszaszórás irányában, miközben változtatjuk a bejövő infravörös lézerimpulzus intenzitását, amit a dimenziótlan vektorpotenciál négyzetével (a_0^2) jellemzünk. A kisebb ábrák a megfelelő egyetlen elektron spektrumok (felül), valamint az elektroncsomagtól származó spektrumok (alul) láthatóak. Az elektroncsomag feltételezett paramétereit ugyanazok, mint a 2.4.3. ábra (a) görbéje esetén.

meg. Ugyanakkor ez a spektrális csúcs az intenzitás növelésével az alacsonyabb frekvenciák felé tolódik el, amely spektrális tartomány kedvezőbb a konstruktív interferencia szempontjából. Ezért a kollektív sugárzásban ez a beszűkült és eltolódott csúcs összességében nagyobb spektrális amplitúdóval jelenik meg, ami nagyobb intenzitású attoszekundumos fényimpulzust eredményez. A „telítési” intenzitásnak pedig az a magyarázata, hogy az intenzitás további növelése már nem tolja el akkora mértékben az első spektrális csúcsot a kisebb frekvenciák felé, hogy annak amplitúdócsökkenését a koherencia szempontjából előnyösebb spektrális tartomány kompenzálni tudja. Ezzel együtt azt mondhatjuk, hogy adott paraméterű elektroncsomaghoz találhatunk egy optimális lézerintenzitást, ahol a kisugárzott attoszekundumos fényimpulzus intenzitása maximális, az elérhető impulzushossz pedig minimális.

2.5.3. Fázismodulált szóródó lézerimpulzus esete

Az intenzív lézerimpulzusok előállításában mérföldkőnek számított Mourou és Strickland 1985-ben publikált újszerű, lézerimpulzus erősítésre szolgáló módszere az ún. fázismodulált impulzusú erősítés [9]. Ezt a módszert a radartechnológiában használták először [95], azonban Mourou és Strickland sikerrel adoptálták a lézertechnológiába. Az azóta eltelt évtizedekben a legkorszerűbb, nagy intenzitású és ultrarövid lézerberendezések kivétel nélkül a fázismodulált erősítésen



2.5.3. ábra. Az attoszekundumos fényimpulzus időbeli alakja a visszaszórás irányában a szóródó lézertér fázismodulációjának (k) különböző értékeire. A betétek szemléltetik különböző fázismoduláció esetén a bejövő lézerimpulzus időbeli alakját (jobbra fent), az egyetlen elektron által kisugárzott mező spektrumát (jobbra lent) és a kollektív sugárzás spektrumát (balra fent). Minden más paraméter megegyezik a 2.4.6. ábráéval.

alapulnak [96], így érdemes megvizsgálni, hogy a bejövő lézerimpulzus fázismodulációjának milyen hatása van az elektronsomag által kisugárzott attoszekundumos fényimpulzusra.

Modellezzük a fázismodulált, infravörös szóródó lézerimpulzust az alábbi alakban.

$$\mathbf{E}(\Theta) = E_0 \hat{\mathbf{e}}_x \sin^2 \left(\frac{\omega_L}{2n_c} \Theta \right) \cos((\omega_L + k \cdot \Theta) \Theta + \varphi_0), \quad (2.5.2)$$

ahol k a lineáris fázismodulációt jellemző paraméter. Ebben az esetben nem tudjuk explicit, analitikus alakban felírni az elektron trajektóriákat, így a (2.3.3a)-(2.3.3b) mozgásegyenletek numerikus megoldásához kell folyamodnunk.

A 2.5.3. ábrán láthatjuk az elektron nano-csomag által kisugárzott attoszekundumos fényimpulzusok időbeli alakját a visszaszórás irányában negatívan ($k < 0$) és pozitívan ($k > 0$) fázismodulált lézerimpulzus esetén. Összehasonlításképpen ábráztuk a 2.4.6. ábrán is látott, fázismoduláció nélküli esetet is. Az elektron nano-csomag paraméterei megegyeznek a korábban is használt, 2.4.3. ábra (a) görbéjének paramétereivel. A betéteken a különböző fázismodulált esetekben szemléltetjük a bejövő lézerimpulzus időbeli alakját, egyetlen elektron által kisugárzott tér spektrális eloszlását, valamint a kollektív sugárzás spektrumát. Az eredmény első ránézésre az intuíciónkkal szembemenő lehet, ugyanis akkor kapunk nagyobb intenzitású, azaz több energiát tartalmazó attoszekundumos fény-

impulzust, ha kevesebb energiatartalommal rendelkező, negatívan fázismodulált lézerimpulzust tételezünk fel. Tehát a szóródó lézerimpulzus energiájának csökkentése, nem pedig növelése, amit a pozitív fázismoduláció okozna, eredményez intenzívebb attoszekundumos fényimpulzust. A 2.5.3. ábrán látható esetben $k = -5 \cdot 10^{-2} \text{ fs}^{-2}$ lineáris fázismodulációval $1 \mu\text{J}$ energiájú attoszekundumos fényimpulzus állítható elő, ami fázismoduláció nélkül kb. 100 nJ energiájú, míg a fényimpulzus hossza lényegében változatlanul 16 as . A jelenség magyarázata, a fázismoduláció okozta amplitúdó változás, valamint a lineáris csúcs eltolása az egy-elektron spektrumában a k előjelének megfelelően. A korábbi vizsgálatainkból tudjuk, a kollektív sugárzás konstruktív interferenciájának szempontjából az alacsonyabb frekvenciájú spektrális tartomány jóval kedvezőbb, mint a magasabb. Azaz a negatív fázismoduláció által okozott spektrális amplitúdó vörös felé történő eltolása, még az amplitúdó csökkenés ellenére is, sokkal előnyösebb, mint a pozitív fázismoduláció miatti spektrális amplitúdó növekedés, hiszen ekkor a spektrális intenzitás nagy része a destruktívan interferáló, nagyfrekvenciás tartományba esik.

2.6. A fejezetben bemutatott eredmények összefoglalása

Ebben a fejezetben elektron nano-csomag és intenzív, lineárisan polarizált, ultrarövid lézerimpulzus Thomson-szórását vizsgáltuk abból az aspektusból, hogy a szórási folyamat segítségével képesek lehetünk-e attoszekundumos fényimpulzus előállítására.

Elméleti modellünket a klasszikus fény klasszikus anyag kölcsönhatás keretein belül tárgyaltuk. Egy, a gyakorlatban gyakran használt lézerimpulzus-modell alak esetén megadtuk az elektron explicit, analitikus trajektóriáját, amelyek tetszőleges paraméterként tartalmazzák az lézerimpulzus ciklusszámát és vivő-burkoló fáziskülönbségét. Ezeket a trajektóriákat felhasználva kiszámoltuk egyetlen elektron által kisugárzott tér spektrális eloszlását, valamint polárszög függését a visszaszórás iránya körüli kis polárszög tartományban. Megvizsgálva a szórt sugárzás spektrumát, valamint annak fázisát megállapítottuk, hogy kedvező lehet makroszkopikus attoszekundumos fényimpulzus előállításának szempontjából. Így ideálisan kezelt elektron nano-csomag sugárzási terét vizsgáltuk tovább. Az elektron-csomag és a lézertér bizonyos paramétereire az egyedi elektronok által emittált kollektív sugárzás konstruktív interferenciája révén 16 as hosszúságú, kb. 100 nJ energiájú fényimpulzus állítható elő.

Változtatva a szóródó lézerimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbségét megállapí-

tottuk, hogy a szórt attoszekundumos fényimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbsége és a lézertér vivő-burkoló fáziskülönbsége között lineáris kapcsolat van. Növelve a bejövő lézerimpulzus csúcsintenzitását láttuk, hogy az attoszekundumos fényimpulzus intenzitása nemlineárisan növekszik egy telítési értékig, ami a kölcsönhatás paramétereitől függ, miközben a nemlineáris tartományon az impulzushossz az intenzitásnövekedéshez képest csak kis mértékben nő meg. Ezen felül megvizsgáltuk az intenzív lézertér fázismodulációjának a hatását a szórt fényimpulzusra, és azt találtuk, hogy megfelelő fázismodulációval növelhető a kollektív sugárzás energiatartalma akár a μJ energiatartományig.

A fenteik alapján az alábbi tézispontokban fogalmazom meg új tudományos eredményeimet.

1. Attoszekundumos fényimpulzus előállításának lehetősége megfelelő elektroncsomagon történő Thomson-szórással [T1,T2]

Partikuláris megoldást adtam egy olyan ponttöltés relativisztikus trajektóriájára, amely kölcsönhat egy, a gyakorlatban sokszor alkalmazott, szinusz-négyzet burkolóval modellezhető lézerimpulzussal. Felhasználva az elektron analitikus trajektóriáját, kiszámoltam egy intenzív, egy-ciklusos, lineárisan polarizált, közeli infravörös lézerimpulzus által egy monoenergetikus elektron nano-csomagon Thomson-szórással létrehozott elektromágneses sugárzás spektrális eloszlását, időbeli alakját, valamint vizsgáltam a térbeli függését is. Megállapítottam, hogy egy megfelelő tulajdonságokkal rendelkező elektron-csomag spektrális szűrés nélkül, csupán a sugárzás kollektív mivoltából adódóan képes félértékszélességben egyetlen optikai ciklust tartalmazó, 16 attoszekundum impulzushosszúságú, 99 nJ energiájú fényimpulzust kisugározni. Ennek spektruma az extrém-ultraibolya-lágy-röntgen spektrális tartományba esik, és az élettudományi szempontból kiemelkedő fontosságú 2,33–4,37 nm hullámhossz közötti „víz ablakot” is tartalmazza.

2. Javaslat attoszekundumos fényimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbségének dinamikus szabályozására [T2]

Megvizsgáltam, hogy a relativisztikus Thomson-szóráskor az elektron nano-csomag által kisugárzott elektromágneses mező hogyan függ a gerjesztő femtoszekundumos lézerimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbségétől. Megállapítottam, hogy a gerjesztő lézerimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbsége és a Thomson-szórás során létrejövő attoszekundumos fényimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbsége között egyszerű, lineáris kapcsolat van, amely dinamikusan kontrollálhatóvá teszi az at-

toszekundumos fényimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbségét, ami különösen fontos például a pumpa-próba kísérletek szempontjából.

3. Javaslat nagy impulzusenergiájú attoszekundumos fényimpulzus előállítására [T3]

Megállapítottam, hogy az elektron-csomagon szóródó lézerimpulzus intenzitását növelve a szórás során létrejövő attoszekundumos fényimpulzus hossza csak kis mértékben növekszik, azonban az intenzitása jelentősen, nemlineárisan nő egy bizonyos telítési értékig, amely a kölcsönhatás paramétereitől függ. Továbbá, amennyiben a bejövő lézerimpulzust fázismoduláltnak tételeztem fel, azt találtam, hogy a megfelelően megválasztott negatív fázismoduláció úgy módosítja a kisugárzott tér spektrális eloszlását, hogy az attoszekundumos fényimpulzus időbeli alakját lényegesen nem befolyásolja, azonban az energiája elérheti a μJ energiatartományt.

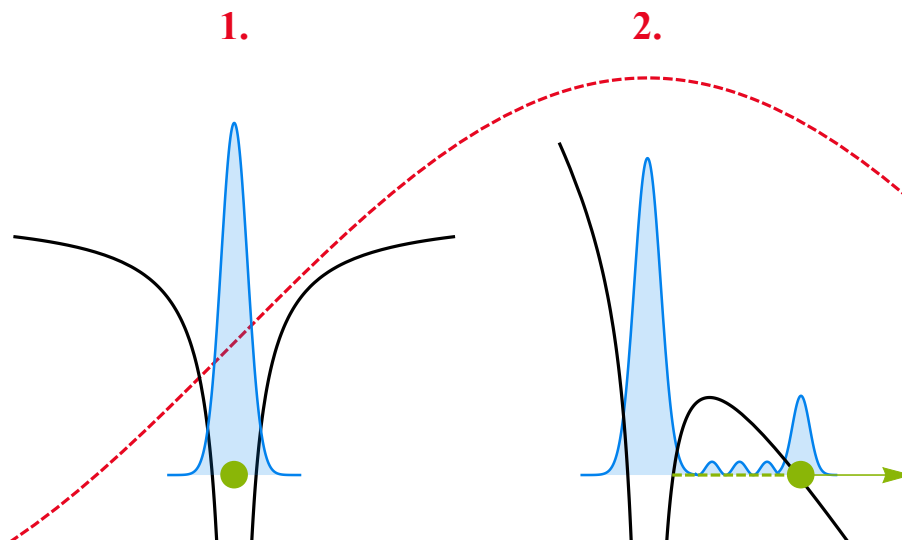
3. fejezet

Erős lézertérben lejátszódó ionizáció vizsgálata a fázistéren

3.1. Bevezetés és irodalmi áttekintés

Az alagúteffektus tanulmányozása lényegében a kvantummechanika születése óta folyamatosan zajlik. Először Hund 1927-ben megjelent cikksorozatában vetette fel a potenciálgáton történő áthaladás lehetőségét, miközben molekulák modell-potenciáljának alapállapotát számította ki [97]. Ugyanebben az évben Mandelstam és Leontovich egy, ma már minden fizikus hallgató által kvantummechanika számolási gyakorlaton elvégzendő feladatot oldottak meg, és publikáltak [98] az akkor újnak számító Schrödinger-egyenlet segítségével, amelyből egyértelműen látszik, hogy véges kiterjedésű potenciálgát esetén a részecske megtalálási valószínűsége a potenciálgáton túl is nagyobb, mint nulla. Egy évvel később, 1928-ban pedig már első ízben, az addig még magyarázat nélküli kísérleti eredmény, az alfabomlás elméleti leírására használta az alagúteffektust Gamow [99], valamint tőle függetlenül Gurney és Condon [100]. Az azóta eltelt lassan száz év alatt szinte megszámlálhatatlan elméleti munka született ebben a témakörben, amelyek segítségével a mindennapi, főként mikro- és nanoelektronikai eszközeink „szerves részévé tettük” az alagúteffektust. Hogy csak egy példát említsünk a sok közül, az anyagtudományban használt pásztázó alagútmikroszkóp, ahogyan a neve is mutatja, az alagúteffektus segítségével képes feltérképezni szilárdtestek felületét. Annak ellenére, hogy már technikai eszközöket is képesek vagyunk fejleszteni az alagúteffektusnak köszönhetően, mai napig rengeteg a nyitott kérdés a jelenség körül.

Az alagúteffektust azért sorolhatjuk az „egzotikus” kvantumjelenségek közé, mert nem tudunk a jelenséget leíró klasszikus fizikai képet társítani hozzá, hiszen a részecske olyan térrészen hatol át, ahol a klasszikus fizika szerint nem tartózkodhat.



3.1.1. ábra. Az erős-teres ionizáció klasszikus és kvantumdinamikai modellje. A részecske helyét a klasszikus fizika szerint egy térbeli pont (zöld pont), a kvantummechanika szerint a hullámfüggvény abszolút értékének négyzete (kék görbe) jellemzi. A lézertér változása során (piros szaggatott görbe) változik az 1. időpillanatban kötött állapotban lévő részecske által „érezett” potenciál (fekete görbe). Amikor a 2. időpillanatra kialakul a potenciálgát, a kvantumos részecske hullámfüggvénye a potenciálgáton túl is felvesz nullától különböző értéket, illetve az ehhez a hullámcsomaghoz asszociált részecske kiszabadul az atomi kötő potenciálból.

kodhat. A klasszikus és kvantummechanikai leírásmódok különbségét szemlélteti a 3.1.1. ábra. A kvantummechanikai tárgyalásmódnak megfelelően az eredetileg kötött állapotban lévő részecske térbeli megtalálási valószínűsége a potenciálgáton túl is vesz fel nullától különböző értéket, miközben a hullámfüggvény túlnyomó része változatlanul kötött állapotban marad, nem elfelejtve, hogy a kvantumrészecskét jellemző hullámfüggvény folytonosan értelmezve van a klasszikusan nem megengedett térrészen is. Ellenben az alagúteffekthuszhoz asszociált klasszikus részecskén azt láthatjuk, hogy az egyik időpillanatban még a potenciálgödörbe „zárt” részecske, a másik időpillanatban már átjutott a potenciálgáton, annak ellenére, hogy a részecske energiája nem tenné ezt lehetővé a klasszikus fizika szerint.

Lézertérrel létrehozott alagúteffektus során az optikai spektrális tartományban lévő, így az atomi és molekuláris méreteknél jóval nagyobb hullámhosszú lézertér

$$V_L(\mathbf{r}) = -e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t) \quad (3.1.1)$$

potenciálja eltorzítja az atomi vagy molekuláris potenciált, így a lézertér frekvenciájától függő rövid időtartamra létrejön a potenciálgát. Ennek nagy előnye, hogy lézertér segítségével, időben kontrolláltan tudjuk tanulmányozni az alagút-

effektust, nem beszélve arról, hogy a nemesgáz atomokon történő magasrendű harmonikus-keltés leírására használt elméleti modellek szerint is alapvető fontosságú ez a folyamat. Azonban a fent említett klasszikus és kvantumos tárgyalásmódok különbözősége okán van néhány fundamentális kérdés, amely a mai napig megválaszolatlan az alagúteffektussal kapcsolatban. Az egyik ilyen, hogy mennyi idő szükséges a részecskének átjutni a potenciálgáton, azaz a klasszikusan nem megengedett tartományon? Ennek a kérdésnek a megválaszolása jó néhány elméleti és kísérleti publikációt inspirált az elmúlt évtizedben, annak ellenére, hogy ezek a munkák sokszor több kérdést vetnek fel, mint amennyit megválaszolnak.

Az alagúteffektus időbeliségének tárgyalásakor, egy klasszikus részecske klasszikus fizika szerint nem megengedett dinamikáját akarjuk jellemezni, tehát ott, ahol a részecske a klasszikus fizika szemszögéből nem tartózkodhat, valamilyen módon megkonstruált trajektóriát akarunk „ráerőltetni”, és ez alapján alagutazási időt rendelni a tisztán kvantummechanikai folyamathoz. Az olvasó nincs egyedül, hogyha disszonanciát érez ezzel kapcsolatban. Ennek dacára több alagutazási idő definíció is kering a köztudatban, amikben az a közös, hogy valamilyen, a vizsgált folyamatot leíró, kvantummechanikai mennyiségből származtatnak idő fizikai dimenziójú mennyiséget, amelyet aztán hozzárendelnek az alagutazás folyamatához.

A definíciók egyik csoportja a hullámfüggvény potenciálgáton áthaladt részéből számol alagutazási időt a komplex függvény amplitúdója vagy fázisa segítségével. Ezekkel a definíciókkal az a fő probléma, hogy eredetileg szabad állapotból szabad állapotba történő szórás időbeliségét jellemezték a segítségükkel, ráadásul leginkább időfüggetlen rendszerek esetén, így például az optikai alagutazásra nem alkalmazhatók. Többek között a fent említett módon definiált alagutazási időket az attoszekundumos fizika és az erős teres ionizációs folyamatok szempontjából tanulmányozta Landsman és Keller [101].

A definíciók egy másik csoportjában a hullámfüggvényből származtatott dinamikus pályákat rendelnek az alagutazáshoz, és statisztikus módszerekkel azt vizsgálják, hogy ezeken a pályákon mennyi időt tölt a részecske az alagút tartományban. Ilyen módszerek a Feynman-féle pályaintegrál és a Madelung-féle kvantummechanika, melyekben az a közös, hogy a klasszikus hatásfüggvényt építik bele a dinamikába, illetve a Wigner-függvény segítségével szintén lehet ilyen pályát definiálni. Ezen módszerek részletes összefoglalását a [102] publikáció tartalmazza.

A harmadik és egyben utolsó csoport, amely az utóbbi időben igen felkapottá vált, és amely véleményünk szerint a legtöbb kérdés és félreértés okozója, az ún. „kvantumórás” megközelítés. Ebben a modellben, mivel az idő csupán egy paraméter a kvantummechanikában, az alagutazás folyamatához valamilyen

megfigyelhető mennyiséget rendelnek, amely ismert módon pont azalatt az időintervallum alatt fejlődik az időben, amíg a pontszerű, klasszikus részecske áthalad az alagút tartományon. Erről a modelltől szintén olvashatunk a [102] munkában.

Kísérleti szempontból több elrendezéssel is végeztek méréseket az alagutazás időbeliségével kapcsolatban. Napjainkban a legnépszerűbb mérési eljárás az ún. attoórás kísérleti elrendezés [103, 104]. Ahogy a módszer neve is mutatja attosekundum nagyságrendű időtartamot szeretnénk mérni, amely időmérést az órához hasonlóan visszavezetünk szögmérésre. A mérés során csupán néhány optikai ciklust tartalmazó cirkulárisan vagy közel cirkulárisan polarizált lézerimpulzust használnak, általában a közeli infravörös spektrális tartományban. A lézerimpulzus polarizációs síkjában forgó elektromos térerősség vektor biztosítja az időmérést akár egy közönséges óra esetén az óramutató. A fókuszált lézerimpulzus kölcsönhat a céltárggyal, ami általában szuperszonikus gázszög, amit alagúteffektus révén ionizál, majd az ionizáció utáni kölcsönhatás révén az ionok és az elektronok hely- és időérzékeny detektorba csapódnak. Annak biztosítása érdekében, hogy azonos elemi folyamatból származó elektron-ion párt detektáljanak, a kölcsönhatás paramétereit úgy állítják be, hogy lézerimpulzusonként legfeljebb egy ionizációs esemény történjen. Maga a mérési eljárás az elektron kanonikus impulzusának megmaradásán alapszik, azaz hogy az elektron detektoron mért \mathbf{p} impulzusát egyértelműen meghatározza a t időpillanatbeli $\mathbf{v}(t)$ sebessége és $\mathbf{A}(t)$ vektorpotenciál értéke.

$$\mathbf{p} = m_e \mathbf{v}(t) + e \mathbf{A}(t). \quad (3.1.2)$$

Az analízis során csupán a kísérletben mért legvalószínűbb impulzus értéket vesszük össze elméleti számításokkal, és vannak le következtetéseket az alagúteffektus időbeliségére. A leggyakrabban használt elméleti modellekben azzal a feltevessel élnek, hogy az alagúteffektussal történő ionizáció akkor „kezdődik”, amikor az elektromos térerősség vektor eléri a maximális értékét. Így az attoórás kísérletben ezen „kezdeti” időpillanat és azon időpillanat között eltelt időt mérik, amikor a elektron „megjelenik” a kontinuumban, azaz az „alagút kijáratában” és csupán a lézertér hatása alatt mozog, majd éri el a detektort. Ekkor, ha tudjuk, hogy pontosan merre mutatott az elektromos térerősség vektor, amikor elérte a maximumát (ezért használnak egyébként enyhén elliptikusan polarizált lézerimpulzust), akkor ez a $\Delta\tau$ időkülönbség az alábbi módon számítható ki,

$$\Delta\tau = \frac{\Delta\alpha}{\omega_L}, \quad (3.1.3)$$

ahol ω_L a lézerimpulzus központi körfrekvenciája, $\Delta\alpha$ pedig a legvalószínűbb mért impulzus és a kezdeti impulzus közötti szög, amely kezdeti impulzust az elektromos térerősségvektor maximális értéke, valamint a kanonikus impulzus

megmaradása egyértelműen meghatároz.

Az attoórás kísérletek kapcsán az utóbbi évtizedben rengeteg mérési eredmény, és még ennél is több elméleti munka született, amelyek megpróbálják a kísérletekkel kapcsolatos ellentmondásokat feloldani, mint például az egyik legújabb és nagyon tanulságos publikáció Hofmann és szerzőtársai tollából [105]. Mindezek ellenére, az attoórás kísérletek értelmezése a mai napig nem mentes az ellentmondásoktól, és a mérés értelmezése körüli vitáktól. Például, hogyan definiáljuk az alagút be- és kijáratát, melyek azok az elméleti közelítések, amelyek nem rontják egy ilyen nagyon precíz mérés kiértékelését, helyesek-e azok az elméleti feltevések, amelyek lehetővé teszik magát a mérést? Illetve nem utolsósorban, a mérési eljárás megköveteli a cirkuláris vagy enyhén elliptikusan polarizált lézertér használatát, tehát lineárisan polarizált lézertérrel attoórás mérést nem tudunk végezni.

Az erős lézertérben történő ionizáció elméleti leírására több népszerű modellt használunk manapság a szakirodalomban. Ezekben az a közös, hogy valamilyen közelítéssel élünk annak érdekében, hogy mérhető mennyiségeket, általában az ionizációs rátát analitikus kifejezésekkel fel tudjuk írni. Az egyik első és legtöbbet hivatkozott modell az erős-teres ionizáció Keldysh-féle modellje [39, 106]. Ebben a modellben a \mathbf{p} impulzussal detektált fotoelektron ionizáció valószínűségi amplitúdójára az alábbi feltevéssel élünk.

$$M(\mathbf{p}) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \langle \Psi_{\mathbf{p}} | \hat{K}(t) | \Psi_0 \rangle dt, \quad (3.1.4)$$

ahol Ψ_0 az elektron kezdeti, a lézertér által nem perturbált, kötött állapota, $\hat{K}(t)$ a Hamilton-operátorban lévő kölcsönhatási tag, amely a lézertér és az elektron kölcsönhatását írja le, $\Psi_{\mathbf{p}}$ az elektron végső állapota, amelyet ebben a modellben egy Volkov-állapottal írunk le, és amit általában dipól-közelítésben, és hosszúság mértéket választva használunk. A kezdeti és végállapot ilyenfajta megválasztását erős-tér közelítésnek nevezzük, hiszen akár többfotonos akár alagúteffektussal történő ionizációt követően az elektron állapotának leírásakor az erősnek feltételezett lézertér mellett elhanyagoljuk az iontörzs Coulomb-potenciálját. A Keldysh-féle elméletet általában alacsony frekvenciás lézerterek esetén alkalmazzuk. Ez azt jelenti, hogy atom ionizációs energiája (I_p) jóval nagyobb, mint az elektromágneses teret alkotó fotonok energiája ($\hbar\omega$), tehát egyetlen foton abszorpciója nem ionizálja az elektront, azaz többfotonos vagy alagúteffektussal történő ionizációs folyamatról beszélünk. Az a dimenziótlan paraméter, amely segít eldönteni, hogy melyik ionizációs csatorna „van nyitva”, az I. részben is említett Keldysh-paraméter, amelyet tekinthetünk a kötött állapotban lévő elektron ka-

rakterisztikus impulzusa $(\sqrt{2m_e I_p})$ és a lézertér által indukált impulzus (eE_0/ω) hányadosának.

$$\gamma = \omega \frac{\sqrt{2m_e I_p}}{eE_0} = \sqrt{\frac{I_p}{2U_p}}, \quad (3.1.5)$$

ahol m_e és e az elektron tömege, valamint töltése, ω a lézertér frekvenciája, E_0 a lézertér maximális térerőssége, I_p az atom ionizációs energiája. A többfotonos ionizáció tartományában a Keldysh-paraméter szemléletesebb interpretációja, ha az atom ionizációs energiája és az elektron lézertérben történő rezgésének egy ciklusra átlagolt kinetikus energiájának, azaz a ponderomotoros energiának $(U_p = e^2 E_0^2 / 4m_e \omega)$ négyzetgyök alatt vett arányának tekintjük. Újból megemlítjük, hogy azt a paramétertartományt, ahol $\gamma \ll 1$, kvázi-statisztikus vagy adiabatisztikus alagutazási tartománynak nevezik a szakirodalomban. Az ellenkező határesetben, amikor $\gamma \gg 1$, a többfotonos ionizációs folyamat a domináns. Kvázi-monokromatikus elektromágneses teret feltételezve a \mathbf{p} impulzussal detektált elektron differenciális ionizációs rátája

$$dW(\mathbf{p}) = \sum_n \delta(\varepsilon_{\mathbf{p}} + I_p + U_p - n\hbar\omega) R(\mathbf{p}) d\varepsilon_{\mathbf{p}} d\Omega_{\mathbf{p}}, \quad (3.1.6)$$

ahol

$$\varepsilon_{\mathbf{p}} = \frac{p^2}{2m_e} \quad (3.1.7)$$

a fotoelektron kinetikus energiája, U_p a ponderomotoros energia, és

$$R(\mathbf{p}) = \frac{m_e \hbar \omega^2 p}{2\pi} |\mathcal{M}(\mathbf{p})|^2, \quad (3.1.8)$$

amelyben $\mathcal{M}(\mathbf{p})$ a (3.1.4) valószínűségi amplitúdó egy optikai ciklusra vonatkoztatott átlagát jelöli. A (3.1.6) képletben a Dirac-delta függvény argumentuma az energiamegmaradást fejezi ki. A Keldysh-elmélet keretein belül a (3.1.6) differenciális ionizációs ráta analitikusan kifejezhető, mert a modell feltevéseit használva az $\mathcal{M}(\mathbf{p})$ valószínűségi amplitúdót analitikusan fel tudjuk írni. Például lineárisan polarizált lézertér esetén

$$\mathcal{M}(\mathbf{p}) = 2\pi i \frac{I_p + p^2/2m_e}{\hbar\omega} \Psi_0(\mathbf{p}) J_n\left(\frac{e\mathbf{E}_0\mathbf{p}}{m_e \hbar \omega^2}, \frac{U_p}{2\hbar\omega}\right), \quad (3.1.9)$$

amelyben $J_n(a, b)$ az általánosított Bessel-függvényt jelenti. A fenti kifejezések segítségével megkapjuk a Keldysh-féle elmélet által jósolt ionizációs rátát, ami

$$W_K \sim e^{-\frac{2I_p}{\hbar\omega} f_K(\gamma)}, \quad (3.1.10)$$

ahol

$$f_k(\gamma) = \left(1 + \frac{1}{2\gamma^2}\right) \operatorname{arcsinh}(\gamma) - \frac{\sqrt{1+\gamma^2}}{2\gamma}, \quad (3.1.11)$$

amit Keldysh-függvényként ismer a szakirodalom.

A Keldysh-elméletnek számos továbbfejlesztése, kibővítése ismert, melyek közül talán a legnépszerűbb a szintén kvázi-statisztikus, erős-tér közelítésen alapuló modell az Ammosov, Delone és Krainov után elnevezett ADK modell [107]. Ebben a modellben a Keldysh-féle statisztikus ionizációs ráta helyett, annak egy optikai ciklusra vett átlagát használjuk, ami lineárisan polarizált lézertérrel feltételezve az alábbi módon függ a kölcsönhatás paramétereitől.

$$W_{\text{ADK}} \sim I_p \cdot \left(\frac{2E_k}{E_0}\right)^{2n^* - |m| - 1} e^{-\frac{2E_k}{3E_0}}, \quad (3.1.12)$$

ahol n^* és m a kiinduló atomi kötött állapothoz tartozó az effektív főkvantumszám és mágneses kvantumszám, valamint

$$E_k = \frac{m_e^2}{e\hbar} \left(\frac{2I_p}{m_e}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (3.1.13)$$

a kezdeti atomi állapothoz tartozó karakterisztikus térerősség. Alagúteffektus vizsgálata esetén mind a Keldysh, mind az ADK modellek az alábbi egyszerű alagút definícióval élnek: azt a koordináta pontot veszik a klasszikusan megengedett tartomány határának, ahol az elektron kötési energiájának értéke elmetstzi a lézertér maximális térerősségéhez tartozó, dipól-közelítésben vett elektromágneses potenciálját, azaz

$$z_0^A = \frac{I_p}{eE_0}, \quad (3.1.14)$$

ahol az „A” felső index arra utal, hogy ez egy adiabatikus alagút definíció. A Keldysh és ADK modellekből származtatott fizikai kép azt mutatja, hogy az elektron impulzusának várható értéke zérus az alagút kijáratában, és a transzverzális kezdeti impulzusa (p_\perp) Gauss-eloszlást mutat.

$$f(p_\perp) \sim e^{-\frac{m_e p_\perp^2}{\hbar e E_0 / \sqrt{2m_e I_p}}}. \quad (3.1.15)$$

Ahogy korábban szó volt róla, a Keldysh és az ADK elméletben feltesszük, hogy az elektron mozgásának tipikus időskálája jóval rövidebb, mint a közeli infravörös vagy hosszabb hullámhosszú lézertér optikai ciklusa, ezért az előbbi esetben sztatikus elektromágneses teret tételezünk fel, az utóbbiban pedig a lézertér egy optikai ciklusára átlagolunk. Keldysh után egy évvel publikáló Perelomov-Popov-Terentev szerzőhármas, a később róluk elnevezett PPT-modell esetén [108], azonban már az időfüggő, nem adiabatikus ionizáció elméleti leírásának is letették az

alapjait. Az elmélet elég komplikált analitikus kifejezéseket tartalmaz, melyek közlésétől itt eltekintünk, azonban azt megjegyezzük, hogy Yudin és Ivanov által elvégzett módosításokkal a modell már egy optikai cikluson belüli dinamikáról is számot tud adni [109]. Nem adiabatikus elmélet révén a PPT modell eltérő módon kezeli az optikai alagutazást, mint a korábban tárgyalt adiabatikus elméletek. Például az alagút kijáratának definíciója is különbözik a (3.1.14) egyenlettel leírtaktól, és legalább az átalagutazott elektron transzverzális, de van hogy a longitudinális irányú kezdőimpulzusát is nullától különbözőnek tekintik. Azonban abban nincs egységes konszenzus a szakirodalomban, hogy egyes szerzők hogyan definiálják ezeket a mennyiségeket, milyen részfolyamatokat építenek bele az alagutazás körülményeinek a definiálásba, gondoljunk itt például, az alagúteffektus előtt az elektron energiájának megváltozására. Az eddigiekben említett, gyakran használt modellek jól működnek egy bizonyos paramétertartományban, azonban széles körben megfelelő pontossággal nem alkalmazhatók. Például a későbbiekben általunk vizsgált, kísérletileg fontos, egységnyi Keldysh-paraméter környéki tartományban pontatlanná válnak, ezért mi ragaszkodunk a Schrödinger-egyenlet direkt, numerikus megoldásához.

Meg kell jegyezzük, hogy a korábbiakban tárgyalt „alagutazási idő” és „kezdeti időpillanat” gyakran összekeveredik a szakirodalomban. Ez egyrészt félreértéseket okozhat az egyes eredmények megértésében, másrészt nagyon megnehezíti a szakirodalomban történő eligazodást. Ezért mi következetesen kezdeti időpillanatnak hívjuk azt az időpillanatot, amikor a részecske már jó közelítéssel klasszikusnak tekinthető, hiszen ebben az időpillanatban indul el a klasszikus részecske azon a klasszikus trajektórián, amin például elérhet egy valódi detektorig.

A későbbiekben az ábrák, valamint numerikus értékek ismertetésekor a tudományterületben szokásos atomi egységrendszert (a.u.) alkalmazzuk, azaz a redukált Planck-állandó (\hbar), az elemi töltés ($|e|$), az elektron tömege (m_e), valamint a Coulomb-állandó ($1/4\pi\epsilon_0$) értékeit egységnyinek választjuk, azonban a formulákat a jobb követhetőség érdekében SI-ben írjuk fel.

Az itt elmondottak alapján úgy gondoljuk, hogy az erős lézertérrel indukált ionizáció még rengeteg nyitott kérdést rejt magában, és szükséges az eddigiektől valamilyen módon eltérő megközelítés, amely kiegészítve a korábbi ismeretekkel talán hozzájárulhat néhány, még nyitott kérdés megválaszolásához vagy legalább a válaszhoz vezető út megtalálásához. Azok a fundamentális kérdések, amelyekkel mi foglalkozunk témában, hogy a klasszikusnak tekintett elektron a lineárisan polarizált lézerimpulzushoz viszonyítva mikortól írható le klasszikus dinamikai modellel, illetve ebben az időpillanatban van-e kezdőimpulzusa, és ha igen, mekkora. Mindenekelőtt meg kell jegyezzük, hogy a korábbiakban tárgyalt „alagutazási idő” és az általunk keresett „kezdeti időpillanat” gyakran összekeve-

redik a szakirodalomban. Ez egyrészt félreértéseket okozhat az egyes eredmények megértésében, másrészt nagyon megnehezíti a szakirodalomban történő eligazodást. Ezért mi következetesen kezdeti időpillanatnak hívjuk azt az időpillanatot, amikor a részecske már jó közelítéssel klasszikusnak tekinthető, hiszen ebben az időpillanatban indul el a klasszikus részecske azon a klasszikus trajektórián, amin például elérhet egy valódi detektorig. Ebben a fejezetben bemutatott eredmények a [T4] publikáción alapulnak.

3.2. Célkitűzések

Az előző szakaszban elmondottak alapján úgy gondoljuk, hogy az erős lézertérrel indukált ionizáció még rengeteg nyitott kérdést rejt magában, és szükséges az eddigiektől valamilyen módon eltérő megközelítés. Ezért célul tűztük ki az erős lézertérben lejátszódó ionizáció, mint időfüggő jelenség kvantum- és klasszikus dinamikájának elemzését és a két dinamika összehasonlítását a fázistéren. Célunk továbbá a folyamat energetikai analízise, valamint az egyes ionizációs csatornák (alagúteffektus, potenciálgát feletti ionizáció) jelentőségének összehasonlítása. Megvizsgáljuk, hogy a Schrödinger-egyenlet megoldásából származó, ionizálódott hullámcsomag kvantumdinamikáját milyen kezdeti feltételekkel rendelkező klasszikus dinamika ír le a legjobban szem előtt tartva a kvantummechanika valószínűségi természetét. Hiszen fontos, és messzemenőig nem triviális kérdés, hogy egy ilyen időfüggő kvantummechanikai folyamat esetén a fázistér mely pontjától reprezentálható a kvantumdinamika a klasszikus fizika eszközeivel. Amennyiben képesek vagyunk a kvantumdinamikát jól leíró klasszikus képet társítani a folyamathoz felmerül a kérdés, hogy a klasszikus dinamika determinisztikus voltát kihasználva, hogyan lehetne mérhető fizikai mennyiségekből visszakövetkeztetni a kvantumdinamikát legjobban modellező klasszikus trajektória kezdeti paramétereire. Ebben a fejezetben bemutatott eredmények a [T4] publikáción alapulnak.

3.3. Az erős-teres ionizáció kvantumdinamikája

3.3.1. A Schrödinger-egyenlet numerikus megoldása

Az alagúteffektus elméleti tanulmányozásának legkézenfekvőbb módja a kvantummechanika mozgásegyenletének, a Schrödinger-egyenletnek a megoldása. Tekintsük egy hidrogén atom erős lézerimpulzusban történő ionizációját. A hidrogén atom, bár egyszerű rendszernek tűnik, igazán hasznos modell, hiszen a használatával elkerülhetők a többelektronos effektusok, csupán egyetlen elektron „tisztá” ionizációját tudjuk vizsgálni. Tegyük fel továbbá, hogy a hidrogén atom egy lineá-

risan polarizált lézerimpulzussal hat kölcsön, ekkor kihasználva a fizikai probléma szimmetriáját a Schrödinger-egyenletet koordinátareprezentációban hengerkoordináták segítségével tudjuk felírni.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(z, \rho, t) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right] \Psi(z, \rho, t) + V(z, \rho, t) \Psi(z, \rho, t), \quad (3.3.1)$$

ahol z a polarizáció iránya, ρ a radiális koordináta, $V(z, \rho, t)$ az atomi potenciál és a külső lézertér potenciáljának az összege, valamint μ az elektron redukált tömege, amellyel figyelembe vesszük a hidrogénatom atommagját alkotó proton véges tömegét. Esetünkben a potenciál az alábbi alakú.

$$V(z, \rho, t) = V_{\text{atom}}(z, \rho) + V_{\text{lézer}}(z, t), \quad (3.3.2)$$

ahol $V_{\text{atom}}(z, \rho)$ jelöli a hidrogén atom Coulomb-potenciálját,

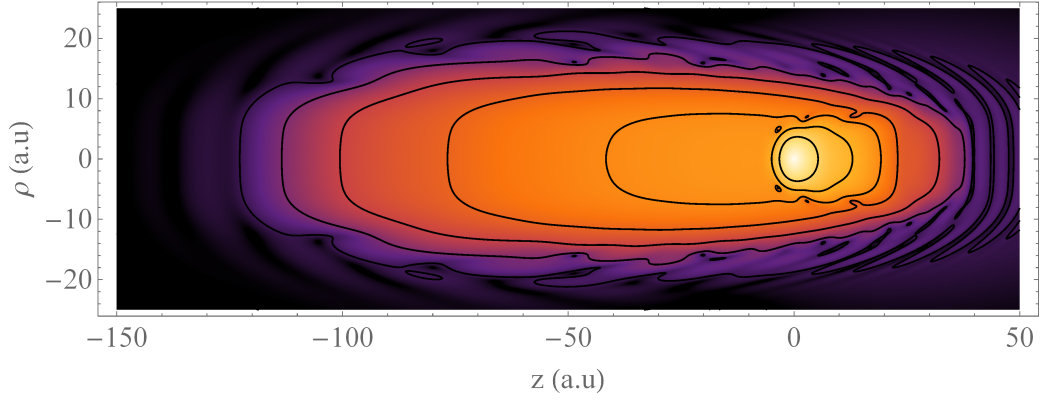
$$V_{\text{atom}}(z, \rho) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\sqrt{z^2 + \rho^2}}, \quad (3.3.3)$$

valamint $V_{\text{lézer}}(z, t)$ a lézertér potenciálját, amely dipól közelítésben és hosszmerékben a következő.

$$V_{\text{lézer}}(z, t) = e \cdot E(t) \cdot z, \quad (3.3.4)$$

ahol $E(t)$ a lézertér elektromos térerőssége. A (3.3.1) egyenlet elegendően pontos megoldásához numerikus módszerekhez kell folyamodnunk, amely azonban igen erőforrás igényes, és messzemenően nem triviális feladat. Majorosi és Czirkák publikáltak 2016-ban egy újszerű numerikus eljárást a hengerszimmetrikus Schrödinger-egyenlet megoldására [110]. Ez az eljárás az operátor bontáson (operator splitting) alapuló hibrid Crank–Nicolson módszer, amely a (3.3.1) egyenlet megfelelően pontos és numerikusan hatékony megoldását teszi lehetővé. A numerikus eljárás részleteit, a korábban fent említett publikáció mellett, Majorosi doktori értekezésében találják meg az érdeklődők [111].

Az 3.3.1. ábrán logaritmikus skálán egy pillanatkép látható a hidrogénatom elektronjának valószínűségi eloszlásfüggvényéről, miközben kölcsönhat egy három-ciklusú, infravörös, intenzív lézerimpulzussal. Észrevehetjük, hogy az elektront nagy valószínűséggel az iontörzs körüli kis térrészben találhatjuk meg, más szóval nagy valószínűséggel az elektron kötött állapotban marad, és csak kis valószínűséggel távolodik el „nagy” távolságra az iontörzstől.



3.3.1. ábra. A hidrogénatom elektronjának valószínűségi sűrűségeloszlása logaritmikus színskálával ábrázolva, miközben kölcsönhat egy z -irányban polarizált lézerimpulzussal, melynek az elektromos térerősségvektorát az $E(t) = E_0 \sin^2\left(\frac{2\pi}{2n_c T}t\right) \cos\left(\frac{2\pi}{T}t\right)$ képlet írja le. Az alkalmazott paraméterek: $E_0 = 0.06$ a.u., $T = 110$ a.u. és $n_c = 3$, valamint a pillanatképet a $t = 165$ a.u. időpillanatban (a lézerimpulzus főmaximumánál) ábrázoltuk.

3.3.2. Az elektron Wigner-függvénye

Ahogy korábban is szó volt róla, az ionizációs folyamat modellezésében az jelenti a kihívást, amikor a folyamatot klasszikus részecske képpel próbáljuk leírni. Éppen ezért érdemes a kvantumdinamikát a fázistér felett vizsgálni, az ott értelmezett, legtöbbször használt kvázi valószínűségi sűrűségfüggvény, a Wigner-függvény segítségével, amely egy igen hasznos eszköznek bizonyul hasonló folyamatok tanulmányozására [112, 113, 114].

Általános esetben az I. részben tárgyalt Wigner-függvényt felírhatjuk $\hat{\varrho}$ sűrűségoperátor segítségével is.

$$W(z, p_z, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ip_z\xi/\hbar} \langle z - \xi | \hat{\varrho} | z + \xi \rangle d\xi, \quad (3.3.5)$$

ahol

$$\hat{\varrho} = \sum_i p_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i|, \quad (3.3.6)$$

itt p_i jelöli annak a valószínűségét, hogy a rendszer a $|\Psi_i\rangle$ -vel jellemzett kvantumállapotban van és

$$\sum_i p_i = 1. \quad (3.3.7)$$

A Wigner-függvény fenti (3.3.5) alakját legtöbbször akkor használják, amikor a vizsgált rendszer nem tiszta hanem ún. kevert állapotban (mixed state) van. Ekkor a teljes rendszer kvantumállapotát a hullámfüggvény helyett a sűrűségoperátorral tudjuk jellemezni.

Mivel mi az elektron ionizációját szeretnénk vizsgálni, ezért ennek az analíziséhez le kell válasszuk az egy protonból és egy elektronból álló hidrogénatom sűrűségmátrixából csak az elektronhoz tartozó részt. Tudjuk, hogy általános esetben az elektron-proton rendszer kvantumállapotát leíró hullámfüggvény nem faktorizálható, azaz

$$\Psi_{e-p}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p, t) \neq \Psi_e(\mathbf{r}_e, t) \Psi_p(\mathbf{r}_p, t), \quad (3.3.8)$$

ahol Ψ_{e-p} az összefonódott rendszer hullámfüggvénye, míg Ψ_e csak az elektronhoz, Ψ_p csak a protonhoz tartozó hullámfüggvény lenne. A Schmidt-féle dekompozíciós tétel segítségével [115, 116, 117, 118] azonban el tudjuk készíteni csak az egyik alrendszerhez, esetünkben az elektronhoz tartozó redukált sűrűségmátrixot a proton koordinátái (\mathbf{r}_p) szerinti integrálással.

$$\varrho_e(\mathbf{r}'_e, \mathbf{r}_e, t) = \int \varrho_{e-p}(\mathbf{r}'_e, \mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p, t) d^3\mathbf{r}_p, \quad (3.3.9)$$

ahol

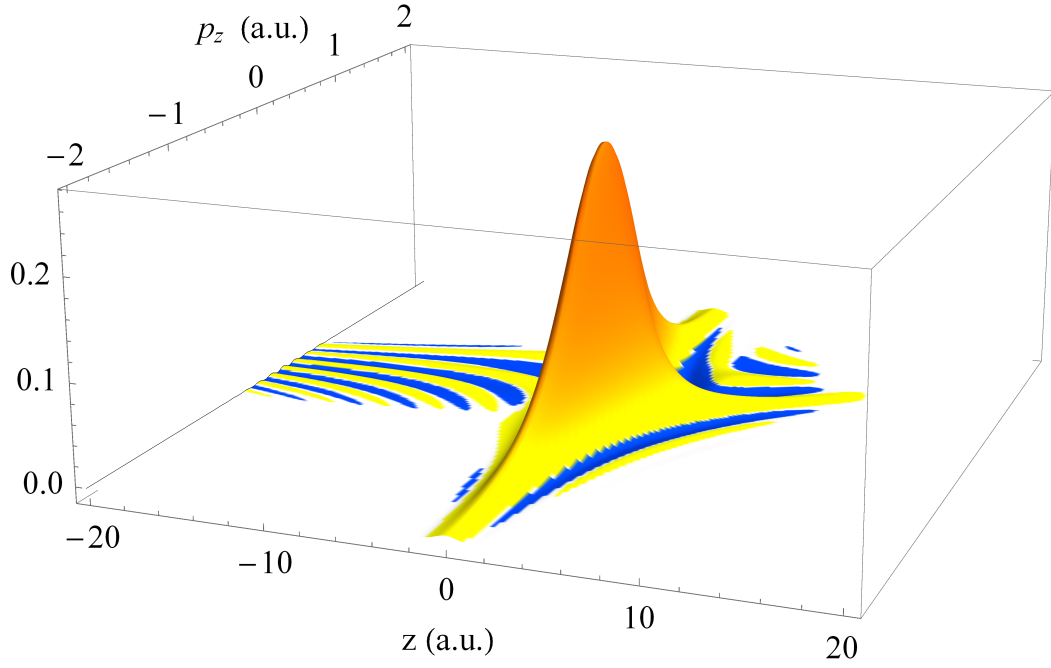
$$\varrho_{e-p}(\mathbf{r}'_e, \mathbf{r}_e, \mathbf{r}'_p, \mathbf{r}_p, t) = \Psi_{e-p}^*(\mathbf{r}'_e, \mathbf{r}'_p, t) \Psi_{e-p}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_p, t) \quad (3.3.10)$$

a csatolt rendszer sűrűségmátrixa. A (3.3.9) sűrűségmátrix ismeretében az elektron Wigner-függvényét már ki tudjuk számolni, és a dinamikáját a fázistéren vizsgálni. Ahogyan a 3.3.1. ábrán is láthatjuk, a vizsgált rendszer dinamikája dominánsan egy dimenzióban, a polarizáció irányában megy végbe. Továbbá a Wigner-függvény ábrázolása és használata egynél több térdimenzió esetén nem célravezető. Ezek alapján az általunk tárgyalt fizikai probléma esetén is szorítkozhatunk az egyszerűbb, egy koordinátától és a vele azonos irányú impulzuskomponenstől függő Wigner-függvény használatára, amelyet a (3.3.9) elektron sűrűségmátrixából úgy számolunk ki, hogy numerikusan kiintegrálunk a ρ_e radiális- és φ_e azimutális elektron koordináták szerint.

A 3.3.2. ábrán a hidrogén atom elektronjának Wigner-függvénye látható. A későbbiekben, az egyszerűbb átláthatóság kedvéért, a Wigner-függvény kontúrjait ábrázoljuk, felülnézetből, két dimenzióban.

3.3.3. A kvantummomentum függvény és a hullámfüggvény kapcsolata

A Wigner-függvény és a fázistér használatának nagy előnye, hogy a Wigner-függvényből mint kvázi-valószínűségi sűrűségfüggvényből intuitív módon tudunk bizonyos mennyiségeket származtatni, amelyek fizikai jelentéssel rendelkeznek. Ilyen kifejezés például a Wigner-függvény p_z koordináta szerinti n -edik monu-



3.3.2. ábra. Pillanatkép a hidrogénatom elektronjának Wigner-függvényéről logaritmikus színskálán ábrázolva, melyet a (3.3.5) képlet alapján az elektron (3.3.9) redukált sűrűségmátrixából számoltunk ki. Az alkalmazott lézertér és paramétere, valamint az ábrázolt időpillanat megegyezik a 3.3.1. ábráéval.

mentuma, azaz

$$P_n(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} p_z^n W(z, p_z, t) dp_z. \quad (3.3.11)$$

Az 1. és 0. momentum hányadosa

$$q(z, t) = \frac{P_1(z, t)}{P_0(z, t)}, \quad (3.3.12)$$

ami fizikai dimenzióját tekintve impulzus dimenziójú.

Az időfüggő Schrödinger-egyenlet Madelung-féle „hidrodinamikai átfogalmazásból” [119] is régóta és jól ismert mennyiség az ún. lokális impulzus vagy kvantummomentum függvény, amely az alábbi alakú.

$$\bar{p}(z, t) = \hbar \frac{\partial}{\partial z} \varphi(z, t), \quad (3.3.13)$$

ahol $\varphi(z, t)$ a

$$\Psi(z, t) = \mathcal{R}(z, t) e^{i\varphi(z, t)}, \quad (3.3.14)$$

a Madelung-féle alakban felírt hullámfüggvény valós fázisa. A (3.3.13) mennyiséget a szakirodalomban az alagutazás tanulmányozásakor sokan használják a potenciálgáton alagúteffektussal átjutott részecske kezdeti impulzusának jellemzé-

sére [120, 121, 122]. A következőkben megmutatjuk, hogy a Wigner-függvényből származtatott (3.3.12) hányados megegyezik a gyakran használt (3.3.13) lokális impulzussal.

Tekintsük a Wigner-függvény I. részben bemutatott alakját koordinátareprezentációban.

$$W(z, p_z, t) = \frac{1}{\pi \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(z + \xi, t) \Psi(z - \xi, t) e^{2ip_z \xi / \hbar} d\xi \quad (3.3.15)$$

Ekkor a Wigner-függvény 0. momentuma az alábbi alakban írható.

$$P_0(z, t) = \frac{1}{\pi \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(z + \xi, t) \Psi(z - \xi, t) e^{2ip_z \xi / \hbar} d\xi \right) dp_z. \quad (3.3.16)$$

A fenti képletben megcserélve a ξ és p_z szerinti integrálás sorrendjét, valamint felhasználva a Dirac-delta

$$\delta(\xi) = \frac{1}{\pi \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ip_z \xi / \hbar} dp_z \quad (3.3.17)$$

integrál előállítását, kapjuk, hogy

$$P_0(z, t) = |\Psi(z, t)|^2. \quad (3.3.18)$$

Tehát a Wigner-függvény impulzus szerinti 0. momentuma nem más mint a részecske valószínűségi sűrűségfüggvénye. Hasonlóan kell eljárni az impulzus szerinti első momentum esetén is, ahol

$$P_1(z, t) = \frac{1}{\pi \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} p_z \left(\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(z + \xi, t) \Psi(z - \xi, t) e^{2ip_z \xi / \hbar} d\xi \right) dp_z. \quad (3.3.19)$$

Itt is megcserélve az integrálás sorrendjét, és felhasználva, hogy

$$\frac{1}{\pi \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} p_z e^{2ip_z \xi / \hbar} dp_z = \frac{\hbar}{2i} \frac{\partial}{\partial \xi} \delta(\xi), \quad (3.3.20)$$

kapjuk, hogy

$$P_1(z, t) = \frac{i\hbar}{2} \left[\left(\frac{\partial}{\partial z} \Psi^*(z, t) \right) \Psi(z, t) - \Psi^*(z, t) \left(\frac{\partial}{\partial z} \Psi(z, t) \right) \right]. \quad (3.3.21)$$

Azaz a Wigner-függvény impulzus szerinti első momentuma a részecske valószí-

nűségi áramsűrűségével arányos. Ezek után, ha a részecske hullámfüggvényét a (3.3.14) alakban írjuk fel, és behelyettesítjük a (3.3.18) és (3.3.21) képletekbe, akkor azt kapjuk, hogy

$$P_0(z, t) = \mathcal{R}(z, t)^2 \quad (3.3.22)$$

és

$$P_1(z, t) = \hbar \mathcal{R}(z, t)^2 \frac{\partial}{\partial z} \varphi(z, t), \quad (3.3.23)$$

ami alapján (3.3.12) és (3.3.13) egyenlősége nyilvánvaló. Az itt bemutatott egyszerű levezetés ellenére, nem találtunk arra utalást a szakirodalomban, hogy a kvantummomentum függvény (vagy lokális impulzus) és a (3.3.12) mennyiség azonossága széles körben ismert tény volna.

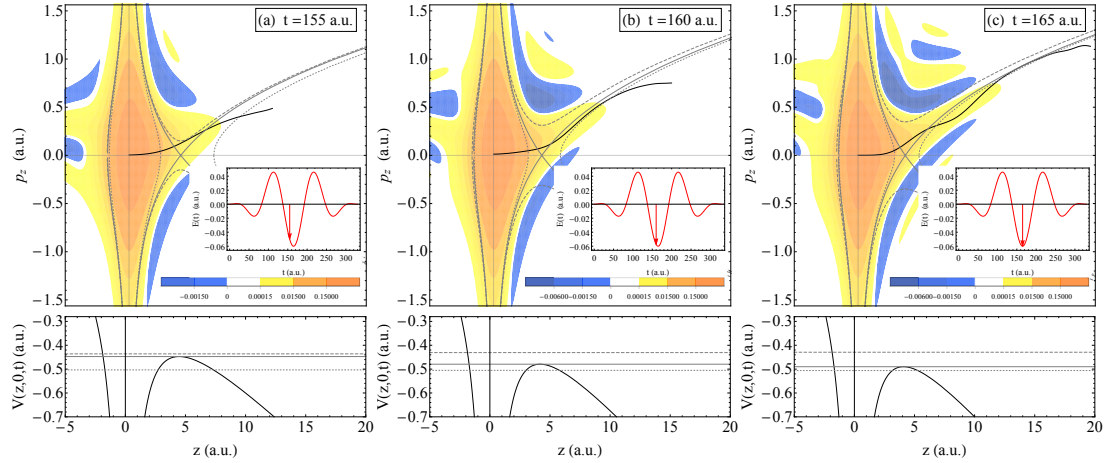
3.3.4. Az erős-teres ionizáció kvantumdinamikájának tulajdonságai

Most, hogy a fejezetben eddig tárgyalt eszközök a rendelkezésünkre állnak, vizsgáljuk meg, a modell hidrogén atom és erős lézerimpulzus kölcsönhatását a fázistéren. A továbbiakban a numerikus számításoknál használt lézerimpulzus elektromos térerőssége az idő függvényében az alábbi alakú.

$$E(t) = E_0 \sin^2\left(\frac{2\pi}{2n_c T} t\right) \cos\left(\frac{2\pi}{T} t + \varphi\right), \quad (3.3.24)$$

ahol E_0 az amplitúdó, T a periódusidő, n_c az optikai ciklusok száma a burkoló alatt, és φ a vivő-burkoló fáziskülönbség. A numerikus értékeket tekintve, $E_0 = 0.06$ a.u., amely a TW/cm^2 csúcsintenzitás nagyságrendjébe esik, $T = 110$ a.u., ami közel megfelel a 800 nm központi hullámhosszú titán-zafír oszcillátorral előállítható lézerimpulzus optikai periódusának. A feltételezett lézerimpulzus csupán $n_c = 3$ optikai ciklust tartalmaz, és először $\varphi = 0$ választással élünk, ami lehetővé teszi, hogy a vizsgált effektusok csupán a lézertér főmaximumának környékén játszanak jelentős szerepet. A választott paraméterek esetén az (1.2.18) Keldysh-paraméter nem sokkal kisebb, mint egy, azaz távol vagyunk mind a tiszta alagúteffektus mind a tisztán többfotonos ionizáció tartományától. Ebben a tartományban az ionizáció dinamikája összetett és bonyolult. Megjegyezzük, hogy az attoszekundumos fényimpulzusok előállítására szolgáló, megszokott, kísérleti módszerek többségénél a Keldysh-paraméter értéke szintén közel van egyhez.

A 3.3.3. ábrán az imént tárgyalt ultrarövid lézerimpulzus hatása látható a modell hidrogén atom elektronjának Wigner-függvényén a lézertér főmaximumához közeli időpillanatokban. Látható, hogy a Wigner-függvény sárgával jelölt része hogyan „áramlik” a klasszikus, stacionárius fázistér trajektóriák mentén. Ez a fajta dinamika mutatja, hogy az elektron potenciálgáton való átjutása egy időben



3.3.3. ábra. A redukált egydimenziós Wigner-függvény logaritmikus kontúrbrázolása (felül) és a potenciálfüggvény (alul) az ábrákon feltüntetett időpillanatokban, miközben a hidrogénatom elektronja kölcsönhat a betétben feltüntetett, (3.3.24) alakú lézerimpulzussal, amelynek paraméterei: $E_0 = 0.06$ a.u., $T = 110$ a.u., $n_c = 3$ és $\varphi = 0$. A felső ábrán fekete folytonos vonallal a kvantummomentum függvényt ábrázoltuk. Szürke pontozott, folytonos és szaggatott vonallal a (3.3.25) stacionárius trajektóriákat ábrázoltuk az alsó ábrán jelzett energiaértékeknél, amelyek rendre az energia várható értéke, a potenciálgát magassága és az energia várható értékének és szórásának összege.

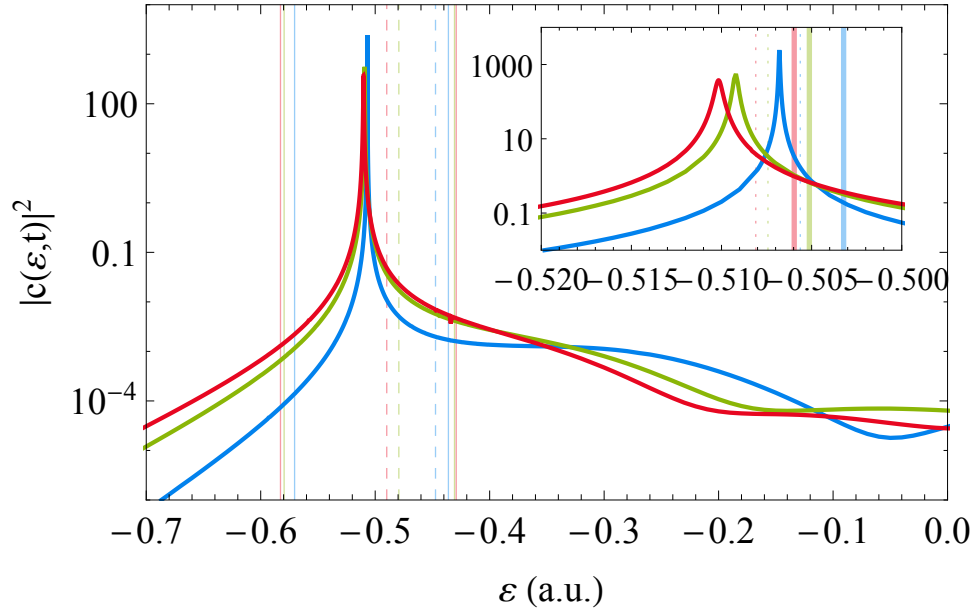
„elnyújtott és elmosódó” folyamat, nehéz egy kitüntetett időpillanatot találni, amikor azt mondhatjuk, hogy az elektron „kiszabadult”. A Wigner-függvény oszcillációi, valamint a negatív tartományai mutatják az erős kvantum interferenciát a különböző ionizációs csatornák között. A Wigner-függvény kontúrvonalai jól követik az adott időpillanatban vett (3.3.2) potenciálhoz tartozó

$$p(z, t) = \pm \sqrt{2m_e (\mathcal{E} - V(z, 0, t))}, \quad (3.3.25)$$

stacionárius trajektóriákat. Három, az ábrázolt időpillanathoz tartozó energia értéket használtunk: az energia várható értékét, a potenciálgát magasságához tartozó energiaértéket, és az energia várható értékének és szórásának összegét. Megállapíthatjuk, hogy a Wigner-függvény távolodó részei nem csupán a várt alagúteffekthoz tartozó, de a potenciálgát feletti ionizáció tartományába eső klasszikus, stacionárius trajektóriát is jelentősen érinti.

Ez arra sarkal minket, hogy részletesebben megvizsgáljuk a kvantumállapot energiaeioszlását. Ehhez a kvantumállapotot az adott időpillanatban ki kell fejtenünk az időponthoz tartozó potenciál sajátbázisában, azaz meg kell keressük a hullámfüggvény

$$\Psi(z, t) = \int_{-\infty}^{\infty} c(\varepsilon, t) u_{\varepsilon}(z, t) d\varepsilon \quad (3.3.26)$$



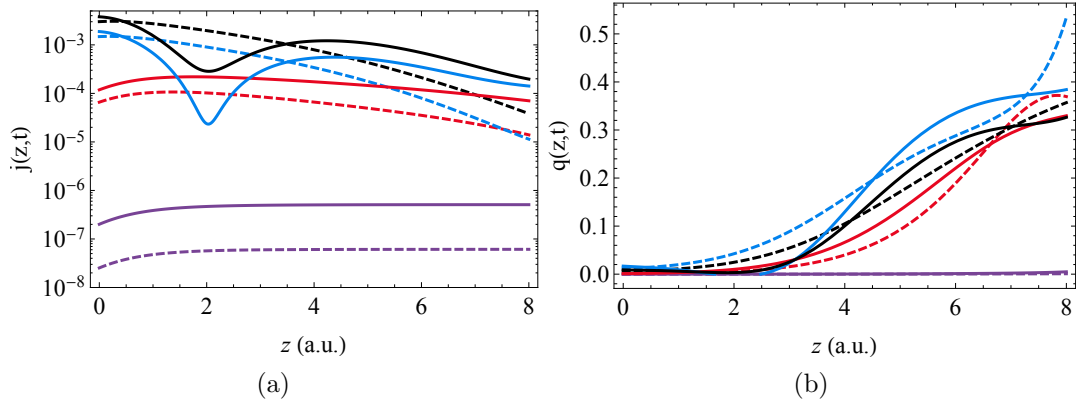
3.3.4. ábra. A kvantumállapot energia szerinti valószínűségi sűrűségeloszlása a $t = 155$ a.u. (kék), 160 a.u. (zöld) és 165 a.u. (piros) időpillanatban. A vékony függőleges, folytonos vonalak mutatják az energia szórását a várható érték körül, a szaggatott vonal a potenciálgát magasságát jelöli az adott időpillanatban a megfelelő színekkel. A betét az éles csúcsok környékét mutatja: a megfelelő színű folytonos vonalak az energia várható értékét, a pontozott vonalak az alapállapot energiáinak kvadrátikus Stark-eltolódással csökkentett értékét jelölik.

felbontását, ahol

$$c(\varepsilon, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(z, t) u_{\varepsilon}(z, t) dz \quad (3.3.27)$$

a kifejtési együttható minden ε energia értékhez tartozó $u_{\varepsilon}(z, t)$ bázisvektorhoz. Ezt munkatársaim meg is tették a $V(z, 0, t)$ potenciálban a szinguláris Coulomb-tagot egy speciális egydimenziós atomi modell-potenciállal helyettesítve [123, 124]. A numerikus eljárással kapott eredmények alapján a 3.3.4. ábrán bemutatjuk az energia szerinti valószínűségi sűrűséget. Ennek a valószínűségi sűrűségnek éles csúcsa látható az alapállapot energiája ($-0,5$ a.u.) alatt, amely különbség nagyságrendileg összhangban van a kvadrátikus Stark-eltolódással.

Ahhoz, hogy megvizsgáljuk a különböző ionizációs csatornák jelentőségét, hasonlítsuk össze az energiaeoszlás alapján az egyes csatornákhoz tartozó valószínűségi áramsűrűségeket, valamint kvantummomentum függvényeket. Az alagút effektushoz, illetve a potenciálgát feletti ionizációhoz tartozó valószínűségi áramsűrűséget megkapjuk, ha energia szerinti felbontásban a rendre a potenciálgát alatti, illetve feletti tartományra integrálunk, azaz a teljes alagúttartományt (TA) lefedő



3.3.5. ábra. (a) A teljes kvantumállapot valószínűségi áramsűrűségének (fekete) összehasonlítása az egyes ionizációs csatornák áramsűrűségével: teljes alagúttartomány (piros), potenciálgát feletti ionizáció (kék) és „szokásos” alagúteffektus (lila), folytonos vonallal a lézerimpulzus csúcsánál ($t = 165$ a.u.) és szaggatott vonallal a $t = 155$ a.u. időpillanatban. (b) A különböző kvantummomentum függvények összehasonlítása, a jelölés és az ábrázolt időpillanatok megegyeznek az (a) ábráéval.

hullámcsomag

$$\Psi_{\text{TA}}(z, t) = \int_{-\infty}^{\varepsilon_h(t)} c(\varepsilon, t) u_{\varepsilon}(z, t) d\varepsilon, \quad (3.3.28)$$

és a potenciálgát feletti ionizációt (PF) leíró hullámcsomag

$$\Psi_{\text{PF}}(z, t) = \int_{\varepsilon_h(t)}^{\infty} c(\varepsilon, t) u_{\varepsilon}(z, t) d\varepsilon, \quad (3.3.29)$$

ahol $\varepsilon_h(t)$ jelöli a potenciálgát magasságát az adott időpillanatban. A hullámcsomagokból ezután a jól ismert,

$$j_{\text{TA/PF}}(z, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left[\Psi_{\text{TA/KF}}^*(z, t) \frac{\partial \Psi_{\text{TA/KF}}(z, t)}{\partial z} - \frac{\partial \Psi_{\text{TA/KF}}^*(z, t)}{\partial z} \Psi_{\text{TA/KF}}(z, t) \right], \quad (3.3.30)$$

képlettel az áramsűrűségek megkaphatók.

A 3.3.5. (a) ábrán láthatóak az egyes ionizációs csatornákhöz tartozó áramsűrűségek, valamint a jobb összehasonlítás érdekében ábrázoltuk a teljes áramsűrűséget, illetve a szokásos, közel egy adott energiánál létrejövő alagúteffektus áramsűrűségét. Ez utóbbit az energia adott időpillanatban vett várható értéke körüli kis energiatartományra ($\pm 0,004$ a.u.) történő integrálással számítottuk ki. Az 3.3.5. (a) ábráról világosan látszik, hogy az ionizáció szempontjából a potenciálgát feletti ionizációs csatorna ugyanolyan fontos, mint a teljes alagúteffektus, annak ellenére, hogy az energia várható értéke, ami a teljes kölcsönhatás során

a potenciálgát magasságánál kisebb, az alagúteffektust vetítené előre. Összevetve a teljes áramsűrűséggel látható, hogy az ionizációs csatornák között jelentős interferencia van. A „szokásos” alagúteffektushoz tartozó áramsűrűség pedig igazából elhanyagolható a másik két folyamat mellett. A teljes alagúttartományhoz és a szokásos alagúteffektushoz tartozó áramsűrűségek nagyságrendi különbségét az egyes, magasabb energiaérekéknél kialagutazott hullámcsomagok lézertérben történő gyorsulásával és ezek interferenciájával magyarázhatjuk. Mindazonáltal az áramsűrűségek analízise megkérdőjelezi az erős-teres ionizációs modellekben használt „éles” energiaértéknél lejátszódó alagúteffektus érvényességét.

A 3.3.5. (b) ábrán az egyes hullámcsomagok kvantummomentum függvényét ábrázoltuk. Láthatjuk, hogy a szokásos alagúteffektussal kiszabaduló hullámcsomag kvantummomentum függvénye elhanyagolható a teljes alagúteffektuséhoz, valamint a potenciálgát feletti ionizációéhoz képest. Az utóbbi néhány évben született, több mérési eredmény is azt támasztja alá, hogy az elektron nullától különböző impulzussal rendelkezik az alagút kijáratában [125, 126, 127, 128], és egyes elméleti modellek az elektron hullámfüggvényéhez tartozó kvantummomentum függvény alagút kijáratában felvett értékével magyarázzák a mérési eredményeket [129, 130, 131, 122]. Mivel láthattuk, hogy a különböző ionizációs csatornák között erős kvantum interferencia van, ezért egy helyes klasszikus modellnek ezek mindegyikéről számot kell adnia. A következőkben törekszünk egy olyan klasszikus modellt társítani a folyamathoz, amely azt minden lehetséges szempontból jól leírja, és tartalmazza a fejezet eddigi tanulságait.

3.4. Az erős-teres ionizáció klasszikus dinamikája

3.4.1. A klasszikus mozgásegyenlet és megoldása

Amennyiben az előző fejezetben bemutatott kvantummechanikai eredmények értelmezéséhez szeretnénk egy klasszikus, intuitív képet alkotni az erős lézertérben lejátszódó ionizációról, elengedhetetlen a fizikai probléma klasszikus fizikai szempontból való megközelítése.

Tekintsük egy m_e tömegű és e töltésű, az iontörzstől valamilyen kvantummechanika folyamattal eltávolodott elektron klasszikus mozgásegyenletét miközben kölcsönhat a lineárisan polarizált lézertérrel és az iontörzs Coulomb-terével.

$$\dot{p}_z(t) = eE(t) + F_z(r), \quad (3.4.1)$$

ahol z a lineárisan polarizált lézertér polarizációjának iránya, $F_z(r)$ az ebbe az irányba ható atomi Coulomb-erő, amelyet érdemes 3 dimenzióban figyelembe

venni, valamint

$$E(t) = E_0 f(t) \cos(\omega t) \quad (3.4.2)$$

az E_0 amplitúdójú $f(t)$ burkolójú lézerimpulzus elektromos térerősségét leíró függvény.

Általános esetben a fenti (3.4.1) egyenletnek nincs analitikus megoldása. Azonban, ha erős-tér közelítést alkalmazunk, azaz az alagúteffektus után eltekintünk az atomi Coulomb-erőtől, a mozgásegyenlet analitikusan megoldható és az általános megoldása

$$p_z(t) = p_0 + e \int_{t_0}^t E(t') dt' \quad (3.4.3)$$

ahol $p_0 = p_z(t = t_0)$ és t_0 jelöli a lézerimpulzus elejéhez viszonyított kezdeti időpillanatot. Ezután ismerve a lézertér elektromos térerősségének időfüggését leíró $E(t)$ függvény konkrét alakját a trajektóriák könnyedén megkaphatók.

3.4.2. A klasszikus trajektóriák kezdeti értékei

Amikor egy kvantummechanikai folyamathoz szeretnénk klasszikus fizikai képet társítani, fundamentális kérdés, hogy a fázistér mely tartományában tehetjük meg ezt jó közelítéssel. A gondolatmenet jobb követhetősége érdekében végigvesszük, hogyan fejlődött ez a definíció az évek során.

Az alagúteffektus tanulmányozásakor, pláne ha időfüggő folyamatról van szó, messzemenőkéig nem triviális, hogyan definiáljuk az alagút tartományt, azaz azt a térrészt, ahol a klasszikus fizika szerint a részecske nem tartózkodhat. Időfüggetlen alagúteffektus esetén ez a definíció szemléletes és magától értetődő. Egyszerű, egydimenziós példán bemutatva, amely azonban könnyedén általánosítható három dimenzióra is, a részecske a klasszikus fizika szerint ott tartózkodhat, ahol az \mathcal{E} energiája nagyobb, mint a részecskét kötött állapotban tartó $\mathcal{V}(z)$ potenciális energia, azaz

$$\mathcal{E} \geq \mathcal{V}(z). \quad (3.4.4)$$

Ez alapján az alagút tartományt azon összetartozó z_{be} és z_{ki} koordináták határolják, amelyekre

$$\mathcal{E} = \mathcal{V}(z_{\text{be/ki}}), \quad (3.4.5)$$

és

$$\mathcal{E} > \mathcal{V}(z < z_{\text{be}}), \quad \mathcal{E} > \mathcal{V}(z > z_{\text{ki}}). \quad (3.4.6)$$

Az itt tárgyalt alagút definíciót használjuk az optikai alagúteffektus adiabatikus elméleti leírása során, ahogyan arról a 3.1. szakaszban is szó volt. Itt újra megem-

lítjük, hogy a Keldysh- vagy ADK-elméletben feltesszük, hogy az alagúteffektus a térerősség maximális értéknél jön létre, ami az elmélet alapgondolatai szerint gyenge, így az alagút kijárata messze kerül az iontörzstől, ezért elhanyagolhatjuk az atomi Coulomb potenciált. Így a kezdetben I_p energiával rendelkező elektron az alagúteffektus kijáratában már csak a lineárisan polarizált lézertér dipól közelítésben vett $z \cdot eE_0$ potenciálját „érzi”. Ekkor az alagút „kijáratát” a

$$z_0^A = \frac{I_p}{eE_0} \quad (3.4.7)$$

egyenlet szerint definiálhatjuk. Megjegyezzük, hogy az alagút „bejáratát” körülményesebben adhatjuk meg, hiszen ott, mivel közelebb vagyunk az iontörzshöz, még nem hanyagolható el a Coulomb-potenciál.

A fenti egyszerű adiabatikus alagút-definíciónál némiképp előrehaladottabb megközelítés, ha végig figyelembe vesszük az atomi Coulomb-potenciált, azaz kilépünk az erős-tér közelítésből. Emellett számításba vesszük, hogy az alagúteffektus nem feltétlenül a térerősség maximális értékénél történik, azaz belefoglaljuk a lézertér potenciáljának időfüggését is. Ekkor az alagút határait az

$$I_p = V(z, t) \quad (3.4.8)$$

egyenlet megoldásából a (3.4.6) feltételek mellett kaphatjuk meg, ahol $V(z, t)$ jelöli az atomi potenciál és a külső lézertér potenciáljának az összegét. Ez a definíció még mindig adiabatikusnak tekinthető, csupán a térerősség maximális értékét helyettesítettük a teljes potenciális energia adott időpillanatbeli értékével, de a részecske esetleges, az alagút effektus előtt történő, lézertérrel való kölcsönhatás során bekövetkező energiaváltozását nem vettük figyelembe.

Amennyiben ezt az energiaváltozást is szem előtt tartjuk, akkor már az alagutazás nem adiabatikus modelljéről beszélünk. Ekkor az alagút határait úgy kapjuk meg, hogy a fenti (3.4.8) képletben a részecske I_p kötési energiáját lecseréljük az adott időpillanatban vett energia értékére, azaz

$$\mathcal{E}(t) = V(z, t). \quad (3.4.9)$$

A fentiekben látott módokon, a fizikai probléma különböző „mélységeiben” megkaphatjuk a tér azon tartományait, ahol az adott modell keretein belül a részecske a klasszikus fizika értelmében tartózkodhat avagy nem tartózkodhat. Azonban ezek az alagút definíciók csupán arról adnak számot, hogy az adott részecske klasszikus pályája honnan indul, első ránézésre arról nem, hogy mikora kezdeti impulzussal. Vannak törekvések, amelyek megpróbálnak valamilyen módon nem nulla kezdeti impulzust rendelni a trajektóriákhoz, azonban ezek

rendszerint sértik az energiamegmaradást. Hiszen, ha kiindulunk a legfejlettebbnek tűnő (3.4.9) nem adiabatikus, időfüggő alagút definícióból, akkor azt kapjuk, hogy a t_0 időpillanatban az a z_0^{NA} koordináta jelöli az alagút kijáratát, amelyre

$$\mathcal{E}(t_0) = V(z_0^{\text{NA}}, t_0), \quad (3.4.10)$$

egyenlőség fennáll. Ebben a térbeli pontban a részecske energiája megegyezik a potenciális energiájával, vagyis a kinetikus energiája zérus. Tehát az alagút definíciójában benne van, hogy a részecske kezdeti impulzusa nulla, így bármely nullától különböző kezdeti impulzus feltételezése inkompatibilis az energiamegmaradással.

Az imént tárgyalt alagút tartomány definíciók egytől-egyig feltételezik, hogy a részecske energiája élesen meghatározott. Ez a feltevés azonban, ahogy korábban láttuk, nem állja meg a helyét olyan időfüggő folyamatok esetén, mint például az általunk tárgyalt erős-teres ionizáció. Ezek alapján új típusú klasszikus trajektóriát javasolunk a folyamat leírására. Egyrészt nyilván intuitív a (3.3.12) kvantummomentum függvény egy pontjának használata, mint a klasszikus trajektória kezdeti impulzusa. Másrészt az 3.3.3. ábrán látott Wigner-függvényes analízis alapján az adott t időpillanatban a potenciális energiához tartozó stacionárius fázistér trajektória,

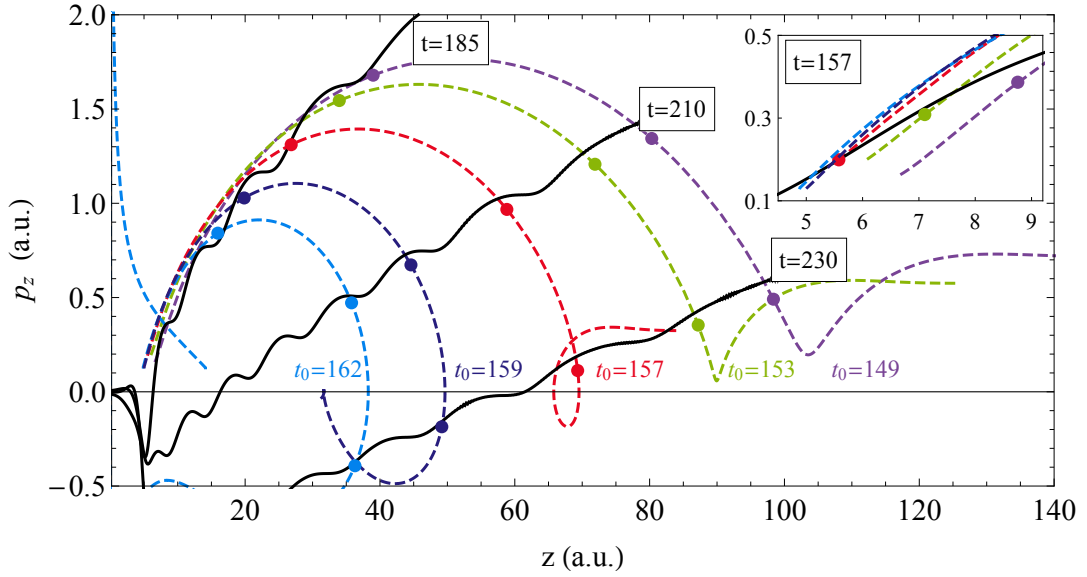
$$p(z, t) = \pm \sqrt{2m_e (\mathcal{E} - V(z, t))}, \quad (3.4.11)$$

origótól távolabb eső inflexiós pontja (z_i) szintén alkalmas kezdeti fázistér pont lehet a klasszikus dinamikához. Ettől a ponttól ugyanis a kvantumdinamika jó közelítéssel klasszikusnak tekinthető, hiszen innen a potenciális energiában a lézertér, dipól közelítésben vett, lejtő potenciálja a számottevő, és mint korábban láttuk, a Wigner-függvény időfejlődését legfeljebb kvadratikusan közelíti a klasszikus Liouville-egyenlet írja le. Figyelembe véve a korábbiakat, minden szóba jöhető kezdeti időpillanat (t_0) esetén csupán egyetlen \mathcal{E} energiaérték van, amelyre fennáll a

$$q(z_i, t_0) = p(z_i, t_0) \quad (3.4.12)$$

egyenlőség. A (3.4.12) egyenlettel definiált fázistér pontokat tekintjük a klasszikus trajektóriák kezdeti értékeinek.

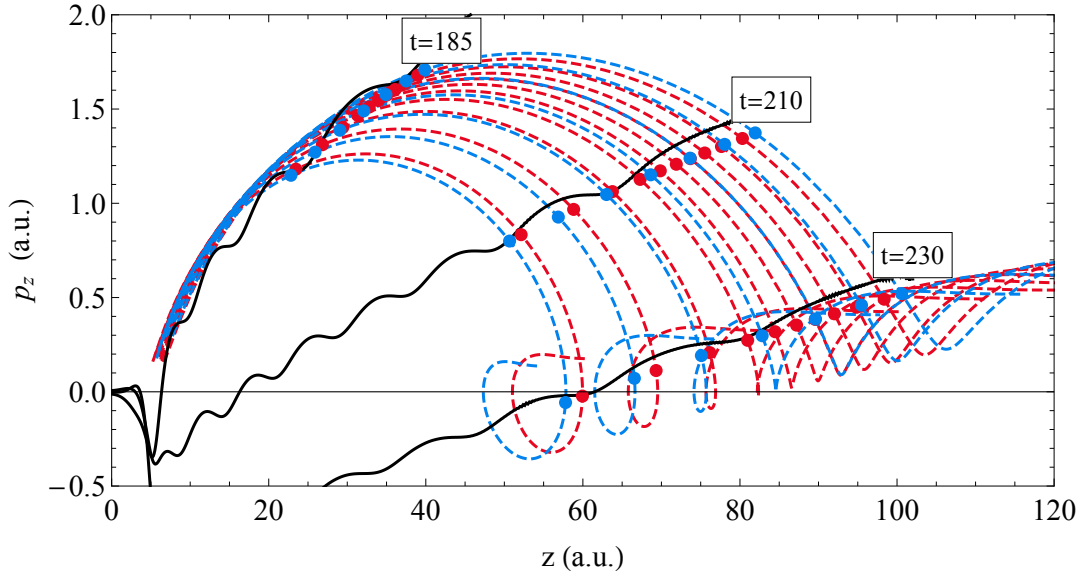
Megjegyezzük, hogy bár a trajektóriákhoz tartozó kezdeti energia minden esetben a potenciálgát feletti ionizáció tartományában van, mint később látni fogjuk, ezek a trajektóriák a kezdeti időpillanat függvényében jó klasszikus reprezentációját adják az összes lehetséges folyamatnak.



3.4.1. ábra. Az iontörzstől kiszabadult elektron fázistér trajektóriái (szaggatott vonalak) különböző, az ábrán jelölt kezdeti időpillanatok esetén. A trajektóriák kezdeti értékeit a (3.4.12) egyenlet alapján adtuk meg, amihez tartozó fázistér tartományt a betét mutatja. A $t_0 = 149, 153$ és 157 a.u. kezdeti időpillanathoz direkt ionizálódó trajektóriák tartoznak rendre lilával, zölddel és pirossal jelölve. A sötétkék egy olyan trajektóriát jelöl ($t_0 = 159$ a.u.), amin az elektron a kölcsönhatás alatt ugyan nem szóródik újra az iontörzsről, de a kölcsönhatás végén nincs elegendő kinetikus energiája, hogy végleg elhagyja az atom környezetét. Világoskékkel egy kölcsönhatás alatt újrászóródó trajektóriát ábrázoltunk ($t_0 = 162$ a.u.). Az ábrán különböző, a jelzett időpillanatokban készített pillanatképeket is feltüntettük a klasszikus dinamikáról (megfelelő színű pontok) és a kvantummomentumról (fekete folytonos vonal).

3.4.3. A kezdeti időpillanat hatása a klasszikus dinamikára

Az előzőekben látott módon a (3.4.12) feltétellel megadtuk a klasszikus trajektóriák kezdeti értékeit. A 3.4.1. ábrán különböző kezdeti időpillanatok esetén látható néhány jellemző trajektória, valamint néhány pillanatkép a trajektóriákon haladó elektronról és a kvantummomentum függvényéről. Megállapítható, hogy az elektronok a kezdeti időpillanattól függetlenül a teljes időfejlődés során közel maradnak a kvantummomentum függvényhez, ami mutatja, hogy jól reprezentálják a valójában kvantummechanikai folyamatot. Amennyiben a kezdeti időpillanat viszonylag távol helyezkedik el a lézertér főmaximumától (a 3.4.1. ábrán használt paraméterek esetén ez 165 a.u.), akkor a trajektóriák a „tisztá”, újrászóródás nélküli ionizációt írnak le. Közeledve a lézertér főmaximumához először olyan trajektóriákkal találkozunk, amelyeken haladva az elektron ugyan energiát nyer a lézertérből, de ez nem elég ahhoz, hogy végleg elhagyja az iontörzset: a kölcsönhatás végén a potenciális energiája abszolút értékben nagyobb, mint a kinetikus, így



3.4.2. ábra. Különböző kezdeti időpillanatokhoz tartozó, a (3.4.12) alapján induló klasszikus trajektóriák (piros szaggatott vonal) és a főszövegben leírt, nem adiabatikus alagúteffektushoz tartozó trajektóriák (kék szaggatott vonal) összehasonlítása. Az ábrán különböző, a jelzett időpillanatokban készített pillanatképeket is feltüntettük a klasszikus dinamikáról (megfelelő színű pontok) és a kvantummomentumról (fekete vonal).

vissza fog térni az iontörzs közelébe. Még későbbi kezdeti időpillanatok esetén pedig olyan trajektóriákat kapunk, amelyek már a lézertérrel történő kölcsönhatás közben újrászóródnak az iontörzsön. Ez utóbbi trajektóriák játszhatnak szerepet olyan fontos folyamatokban, mint a magasrendű harmonikus-keltés vagy többelektronos atomoknál a nem szekvenciális kétszeres ionizáció.

Megjegyezzük, hogy vannak a szakirodalomban más kvantum momentumon alapuló klasszikus trajektóriák [132, 129, 131, 133, 121, 122], amelyekben az a közös, hogy az alagúteffektust tételezik fel egyetlen folyamatként. Például az egyik legfejlettebb ilyen modellben [122] a szerzők a (3.4.9) egyenlettel leírt nem adiabatikus alagút definíciót veszik alapul a lézertér főmaximumánál (t.i. ekkor a legvalószínűbb az alagúteffektus). Az általuk feltételezett trajektória kezdeti impulzusa pedig a kvantummomentum függvény értéke az alagút kijáratában. Véleményünk szerint, ez a modell több kérdést is felvet. Először is miért csupán egyetlen kezdeti időpillanat lehetőségét veszi számításba? Egy értelemszerű általánosítása ennek a modellnek, ha feltesszük, hogy az elektron nem csak a lézertér főmaximumánál, hanem annak ésszerű környezetében is kialakutazhat, ekkor már számot ad a folyamat kvantumos természetéről. Azonban a másik probléma ezzel (és minden más hasonló klasszikus modellel), hogy az alagút definíciója alapján szükségszerűen nulla impulzussal kellene rendelkeznie az elektronnak a trajektória kezdőpontjában. Tehát ezek a modellek egytől-egyig sértik az energiamegmar-

dást, de természetesen vannak törekvések az említett ellentmondás feloldására [134, 135]. A 3.4.2. ábrán összehasonlítjuk az előbb említett nem-adiabatikus alagúteffektushoz tartozó trajektóriákat az általunk javasoltakkal. Megállapítható, hogy minden alagúteffektust feltételező trajektóriához találunk olyan általunk javasoltat, amely a mérhető mennyiség, jelen esetben az elektron detektálható impulzusa szempontjából azonos. Azonban, mivel az általunk javasolt esetben mindig a potenciálgát feletti ionizáció tartományában vagyunk, nem nulla kezdeti impulzus esetén is minden további feltevés nélkül teljesül az energiamegmaradás.

3.5. A direkt ionizáció dinamikája és a kezdeti időpillanat rekonstrukciója

3.5.1. Az ionizálódott hullámcsomag előállítása

Még részletesebben meg tudjuk vizsgálni az elektron iontörzs környezetéből való kilépésének folyamatát, ha megkonstruáljuk az elektron hullámfüggvényének azon részét, amely a lézertérrel történő kölcsönhatás végén, legyen ez az időpillanat t_f , pozitív energiával rendelkezik, tehát amely elérhet egy makroszkopikusan nagy távolságra elhelyezett detektort. Ezt a hullámcsomagot úgy állítjuk elő, hogy numerikusan megoldjuk a (3.3.1) Schrödinger-egyenletet a lézertérrel történő kölcsönhatás teljes időtartamára, majd a kölcsönhatás végén a hullámfüggvény kötött állapotokra való projekcióját kivonjuk a teljes hullámfüggvényből.

$$\chi(\mathbf{r}, t_f) = \Psi(\mathbf{r}, t_f) - \sum_{n,l,m} c_{n,l,m}(t_f) \psi_{n,l,m}(\mathbf{r}), \quad (3.5.1)$$

ahol $\chi(\mathbf{r}, t)$ a pozitív energiás hullámcsomag, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ a teljes hullámfüggvény és $\psi_{n,l,m}(\mathbf{r})$ a hidrogén atom kötött állapotai, és természetesen

$$c_{n,l,m}(t_f) = \langle \psi_{n,l,m}(\mathbf{r}) | \Psi(\mathbf{r}, t_f) \rangle. \quad (3.5.2)$$

Ultrarövid, csupán néhány optikai ciklust tartalmazó lézertér esetén ugyancsak érdekes lehet megvizsgálni a kölcsönhatás végén pozitív energiás és bizonyos irányú impulzussal rendelkező hullámcsomagot is, hiszen így a polarizáció mentén külön tudjuk vizsgálni az egyes irányokba történő kilépési folyamatot. A pozitív, illetve negatív impulzusú hullámcsomagot megkapjuk, ha a $\chi(\mathbf{r}, t_f)$ pozitív energiás hullámcsomag impulzus reprezentációban $\tilde{\chi}(\mathbf{p}, t_f)$ vett alakjában nullával helyettesítünk minden negatív, illetve pozitív féltengelyen felvett értéket. Kép-

lettel kifejezve a $\chi^{\text{PI}}(\mathbf{r}, t_f)$ pozitív energiás és pozitív impulzusú hullámcsomag

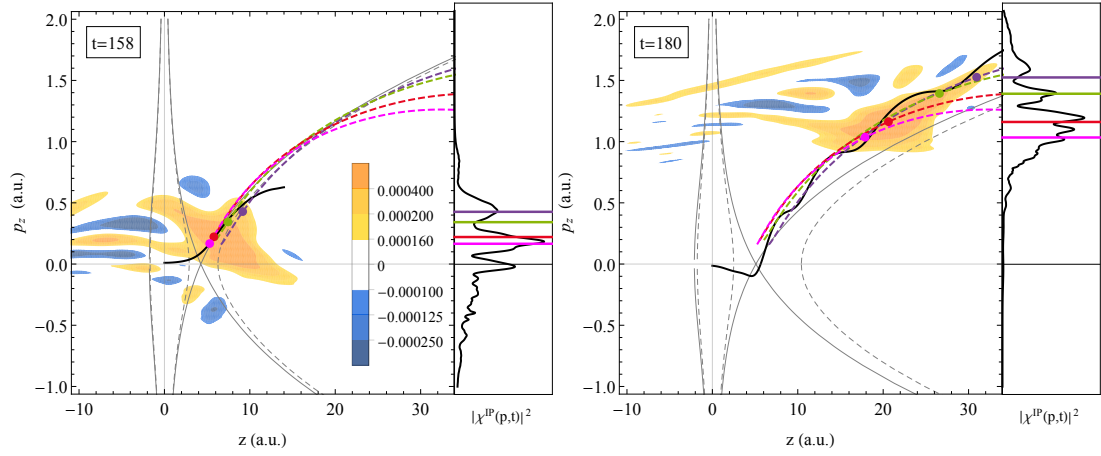
$$\chi^{\text{PI}}(\mathbf{r}, t_f) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \int (\tilde{\chi}(\mathbf{p}, t_f) \cdot \Theta(\mathbf{p})) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} d^3\mathbf{p} \quad (3.5.3)$$

alakban áll elő, ahol $\Theta(\mathbf{p})$ a szokásos lépcsőfüggvényt jelöli.

A fenti eljárásokkal tehát megkaphatjuk a kölcsönhatás végén pozitív energiás, illetve ezen belül is pozitív impulzussal rendelkező hullámcsomagokat. Ezeket úgy használjuk fel, hogy, mivel a (3.3.1) Schrödinger-egyenlet időben elsőrendű differenciálegyenlet, az idő irányát egy előjel cserével megfordítva időben visszafele propagáltatjuk a hullámcsomagot, így információt nyerhetünk arról, hogy a hullámfüggvény azon része, amely végül valóban egy detektorba csapódott elektronként manifesztálódhat, hogyan is alakul ki. Megjegyezzük, hogy a megfelelő Wigner-függvény megalkotása a $\chi^{\text{PI}}(\mathbf{r}, t)$ -vel jellemzett hullámcsomag esetén is hasonló a korábban, a teljes hullámfüggvényénél alkalmazotthoz.

3.5.2. A pozitív energiás és pozitív impulzusú hullámcsomag Wigner-függvénye és a klasszikus trajektóriák

A 3.5.1. ábrán összehasonlítjuk az előzőekben megalkotott $\chi^{\text{PI}}(\mathbf{r}, t)$ hullámcsomag Wigner-függvényét azokkal a klasszikus trajektóriákkal, melyek az általunk bevezetett (3.4.12) kezdeti értékekkel indulnak. A $t = 159$ a.u. időpillanatban készült pillanatkép világosan mutatja, hogy az alagúteffektus mellett a hullámcsomag jelentős része a potenciálgát feletti ionizációval szabadul ki az iontörzs közvetlen környezetéből. Ez a megfigyelés is alátámasztja az eddigi érvelésünket, valamint ellentmond az erős-teres ionizációról korábban alkotott, csupán alagúteffektust figyelembe vevő modellnek. Továbbá láthatjuk, hogy nincs egy kitüntetett trajektória, amely megfelelő reprezentációja lehetne a kvantummechanikai folyamatnak. Viszont a trajektóriák egy alkalmasan megválasztott, különböző kezdeti időpillanathoz tartozó csoportja már jó leképezését adja a folyamatnak, és mindemellett a kezdeti időpillanaton keresztül magukba foglalja a kvantumdinamika időben „elkent” tulajdonságát. Továbbá jól megfigyelve a $t = 159$ a.u. és 180 a.u. időpillanatban készült ábrákat, észrevehetjük, hogy a Wigner-függvény értékei közelítőleg állandóak maradnak a klasszikus elektronokat jelző pontok kis környezetében, melynek oka, hogy a klasszikus dinamika kezdeti fázistér pontjától számolva a Wigner-függvény időfejlődését valóban jó közelítéssel a Liouville-egyenlet írja le. Így nyugodtan rendelhetünk az egyes trajektóriákhoz valószínűségeket, hiszen a mozgás során ezek közel állandóak maradnak.



3.5.1. ábra. Az iontörzstől kiszabadult elektron klasszikus és a $\chi^{\text{PI}}(\mathbf{r}, t)$ hullámcsomaggal jellemzett kvantumdinamikájának összehasonlítása az ábrán jelzett időpillanatokban. Az ionizálódó hullámcsomag Wigner-függvény színezett kontúraival, a kvantummomentum függvényt folytonos fekete vonallal ábrázoltuk. A szürke vonalak a pillanatnyi potenciálhoz tartozó stacionárius trajektóriákat jelölik az energia várható értékénél (szaggatott) és a potenciálgát magasságánál (folytonos). A lila, zöld, piros és rózsaszín trajektóriák rendre a 149, 153, 157 és 158 a.u. kezdeti időpillanathoz tartoznak, és a kezdeti értékeiket a (3.4.12) alapján határoztuk meg. A megfelelő színű pontok a trajektóriákon haladó elektron pillanatnyi helyzetét mutatja. Jobb oldalon a $\chi^{\text{PI}}(\mathbf{r}, t)$ hullámcsomag pillanatnyi impulzuseloszlását látjuk, a megfelelő vonalak a klasszikus elektron impulzusértékét jelölik.

3.5.3. A kezdeti időpillanat meghatározása az elektron detektoron mért impulzusából

A kísérleti eredmények értelmezésére széles körben használt, egyszerű elméleti modellek feltételezik, hogy alagúteffekttussal történő ionizáció a lézertér főmaximumánál játszódik le és gyakran nullának tekintik az elektron kezdeti impulzusát az alagút kijáratában. Amennyiben eltekintünk a kiszabaduló elektron és az iontörzs közötti Coulomb-kölcsönhatástól, az elektron polarizáció irányú impulzusa a kölcsönhatás végén ($t_f = n_c T$) a (3.4.3) egyenlet alapján az alábbi.

$$p_f^{\text{NC}} = p_0 + \int_{t_0}^{t_f} eE(t) dt, \quad (3.5.4)$$

ahol az „NC” felső index jelöli, hogy Coulomb-teret nem tartalmazó mozgásegyenlettel számoltunk. A (3.5.4) egyenletben két ismeretlen mennyiség van, az elektron kezdeti impulzusa (p_0) és a kezdeti időpillanat (t_0), amelyek, valamint a lézertér időbeli alakjának ismeretében p_f^{NC} megkapható. Vagy fordítva, ahogyan sok kísérleti eredmény analízise során felteszik, hogy p_f^{NC} mérhető lehet egy im-

pulzusedetektoron és egyéb, p_0 -ra vagy t_0 -ra vonatkozó elméleti feltevással a másik ismeretlen mennyiség megkapható.

A valóságban a kiszabaduló elektron egészen addig kölcsönhat az iontörzs Coulomb-potenciáljával, amíg el nem éri a „végtelen távol elhelyezett” detektort. Ekkor a detektoron mérhető impulzusa

$$p_d = \pm \sqrt{(p_f^C)^2 + 2m_e V_{\text{atom}}(z(t_f))}, \quad (3.5.5)$$

ahol p_f^C az elektron impulzusa és $V_{\text{atom}}(z(t_f))$ a potenciális energiája a t_f időpillanatban. Természetesen a „C” felső index jelöli, hogy ebben az esetben figyelembe vettük a Coulomb-kölcsönhatást az elektron és az iontörzs között. A \pm jelöli, hogy az elektron impulzusát a polarizáció irányában az atomtól jobbra vagy balra detektáljuk. Ez az előjel megegyezik p_f^C előjelével. A korábbiakban használt, egyetlen domináns főmaximummal rendelkező lézerimpulzus esetén a két irány jelentősége nagyon különböző, azonban, ha változtatjuk a vivő-burkoló fáziskülönbséget, mindkét irányban számottevő valószínűséggel detektálhatunk elektront.

A következőkben bemutatunk egy eljárást arra, hogy felhasználva az általunk bevezetett trajektóriákat, hogyan lehet az elektron detektált impulzusából közelítőleg meghatározni a direkt ionizáció trajektóriájának kezdeti időpontját, és ez alapján a kezdeti impulzusát. Vizsgáljuk meg először, hogy egy Coulomb-teret figyelembe vevő és azt elhanyagoló trajektórián a lézertér munkája mire fordítódik.

$$W^{\text{NC}} = T_f^{\text{NC}} - T_0, \quad (3.5.6a)$$

$$W^{\text{C}} = T_f^{\text{C}} - T_0 + V_{\text{atom}}(z(t_f)) - V_{\text{atom}}(z(t_0)), \quad (3.5.6b)$$

ahol $T_f^{\text{NC}} = \frac{(p_f^{\text{NC}})^2}{2m_e}$ és $T_f^{\text{C}} = \frac{(p_f^{\text{C}})^2}{2m_e}$ a kinetikus energiák a t_f időpillanatban, $T_0 = \frac{p_0^2}{2m_e}$ az elektron kezdeti kinetikus energiája, ami mindkét esetben megegyezik, hiszen a két típusú trajektória kezdeti értékei azonosak. A (3.5.6a) és (3.5.6b) egyenletek alapján a Coulomb-teret nem tartalmazó trajektória végpontjában az elektron impulzusa

$$p_f^{\text{NC}} = \pm \sqrt{p_d^2 - 2m_e (V_{\text{atom}}(z(t_0)) + \Delta W)}, \quad (3.5.7)$$

ahol $\Delta W = W^{\text{C}} - W^{\text{NC}}$, és a \pm ismételten az elektron távozásának két lehetséges irányát jelöli, és megegyezik p_d előjelével. A $V_{\text{atom}}(z(t_0)) + \Delta W$ tagot közelíthetjük egy $V_{\text{atom}}^{\text{eff}}(z_0) = e/z_0$ effektív atomi potenciális energiával, ami csupán a z_0 kezdeti koordináta függvénye. Tudjuk, hogy a lehetséges klasszikus pályák a

E_0	t_0	151	152	153	154	155	156	157
0.060	t_0^R	153.11	153.56	153.99	154.47	155.06	155.84	156.84
	z_i	6.69	6.30	6.10	6.02	5.92	5.78	5.58
	z_0^R	6.24	6.02	5.89	5.82	5.75	5.65	5.56
0.055	t_0^R	152.88	153.44	153.99	154.58	155.27	156.09	157.04
	z_i	6.56	6.41	6.28	6.16	6.02	5.85	5.64
	z_0^R	6.27	6.17	6.09	6.01	5.92	5.82	5.72
0.050	t_0^R	152.65	153.33	153.98	153.41.23	154.20	155.14	156.21
	z_i	6.85	6.65	6.49	6.32	6.15	5.96	5.74
	z_0^R	6.54	6.43	6.32	6.41	6.30	6.16	6.03

3.1. táblázat. A trajektóriák valódi (t_0, z_i) és a főszovegben leírt módon rekonstruált (t_0^R, z_0^R) kezdeti időpillanatai és helykoordinátái különböző térerősségértékek (E_0) esetén.

(3.4.11) stacionárius trajektóriák inflexiós pontjából indulnak, és szimulációs tapasztalataink alapján azt is, hogy a kezdeti impulzusértékek széles kezdeti időpont tartományban közel esnek egymáshoz. Ezért a p_0 kezdeti impulzust a lehetséges impulzusértékek átlagával közelítjük. Ez természetesen egy valódi kísérletben is megtehető a kísérletet támogató szimuláció elvégzésével.

A fenti gondolatmenet alapján képesek vagyunk egy iteratív eljárást alkotni, amely a lézerimpulzus időfüggésének ismeretében az elektron detektoron mért impulzusa alapján közelítőleg rekonstruálja, hogy az elektron az általunk bevezetett, lehetséges trajektóriák közül, mely kezdeti időpillanathoz tartozón jutott el a detektorig. Az iteráció kezdeti paramétere z_0 , amely a szóba jöhető atomi méretek skáláján széles tartományon változtatható, és csupán alsó korlátja van, ezért érdemes egy, az iontörzstől viszonylag távoli, kezdeti koordinátát kijelölni. Ezután az iteráció lépései a következők:

1. A z_0 bemeneti paraméter és p_d detektált impulzus alapján meghatározzuk az elektron impulzusát egy olyan Coulomb-teret nem tartalmazó trajektória végpontjában, ami ugyanazokkal a kezdeti feltételekkel rendelkezik, mint amin valójában eljuthatott a detektorig. Képlettel

$$p_f^{\text{NC}} = \pm \sqrt{p_d^2 - 2m_e V_{\text{atom}}^{\text{eff}}(z_0)}. \quad (3.5.8)$$

2. Ezután a (3.5.4) egyenlet átrendezett formájával meghatározzuk a t_0 kezdeti időpillanatot.

$$p_f^{\text{NC}} - \tilde{p}_0 = \int_{t_0}^{t_f} eE(t) dt, \quad (3.5.9)$$

itt \tilde{p}_0 a szimuláció alapján megkapott lehetséges kezdeti impulzusok átlag-értékét jelöli, valamint a jobb oldalon lévő integrál a (3.3.24) alakú lézer-impulzusra analitikusan kiszámolható.

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^{t_f} eE(t) dt = & \frac{eE_0}{4\omega(n_c^2 - 1)} \left[-2 \sin(2n_c\pi + \varphi) - 2(n_c^2 - 1) \sin(\omega t_0 + \varphi) \right. \\ & + n_c(n_c + 1) \sin\left(\frac{(n_c - 1)\omega t_0}{n_c} + \varphi\right) \\ & \left. + n_c(n_c - 1) \sin\left(\frac{(n_c + 1)\omega t_0}{n_c} + \varphi\right) \right] \end{aligned} \quad (3.5.10)$$

3. Majd az így kiszámolt kezdeti időpillanattal és a

$$p_{\text{infl}}(z, t) = \mp i \sqrt{\frac{m_e}{\frac{\partial^2}{\partial z^2} V_{\text{atom}}(z)}} \left(eE(t) - \frac{\partial}{\partial z} V_{\text{atom}}(z) \right) \quad (3.5.11)$$

stacionárius trajektóriák inflexiós pontjára vonatkozó formulával új z_0 számolható a következő egyenlőségből,

$$\tilde{p}_0 = p_{\text{infl}}(z_0, t_0). \quad (3.5.12)$$

A fenti három lépést ismételve, általában már 4-5 iteráció után konvergens eredményt kapunk. Az eljárást a következő „numerikusan kísérlet” segítségével teszteltük: A reálisan számításba jöhető kezdeti időpillanatokhoz a (3.4.12) definíció alapján trajektóriákat rendeltünk, amelyeket a (3.4.1) mozgásegyenlet alapján időben fejlesztettünk a lézertérrel történő kölcsönhatás végéig. Ezután a (3.5.5) egyenletből kiszámoltuk a detektoron mérhető impulzusértéke. Majd ebből indítva az iterációs eljárást, a kapott értékeket összevetettük a trajektória tényleges kezdeti értékeivel.

Ennek eredményeit a 3.1. és 3.2. táblázatokban foglaltuk össze, amelyek jól mutatják az iteratív módszerünk hatékonyságát és pontosságát. A 3.1. táblázat alapján látható, hogy a vizsgált térerősség tartományon az eljárás igen jól működik, valamint a 3.2. táblázatból megállapítható, hogy független a vivő-burkoló fáziskülönbség változtatására. Általánosságban elmondható, hogy a rekonstrukciós módszer pontatlanabb a kevésbé valószínű trajektóriák esetén, amikor a kezdeti időpillanat távolabb van a lézerimpulzus csúcsától. Ekkor nagyságrendileg 2 a.u. (kb. 50 as) eltéréssel adja meg a kezdeti időpillanatot, azonban a legvalószínűbb trajektóriák esetén ez az eltérés egy nagyságrenddel kisebb. A tendencia megegyezik a kezdeti koordináta rekonstrukciója esetén is. Az így megkapott kezdeti időpillanat (t_0^R) , valamint kezdeti koordináta (z_0^R) alapján a trajektória

$\varphi = 0.25\pi$	t_0	139	140	141	142	143	144	145
	t_0^R	140.04	140.66	141.33	142.10	142.95	143.83	144.62
$\varphi = 0.50\pi$	t_0	122	123	124	125	126	127	128
	t_0^R	123.40	124.31	125.11	125.83	126.54	127.24	127.97
	t_0	179	180	181	182	183	184	185
	t_0^R	181.29	181.35	181.42	181.62	182.03	182.79	184.11
$\varphi = 0.75\pi$	t_0	106	107	108	109	110	111	112
	t_0^R	106.87	108.19	109.26	110.23	111.08	111.86	112.56
	t_0	165	166	167	168	169	170	171
	t_0^R	167.15	167.41	167.66	167.99	168.48	169.25	170.39

3.2. táblázat. A trajektóriák valódi (t_0) és a főszövegben leírt módon rekonstruált (t_0^R) kezdeti időpillanatai különböző vivő-burkoló fáziskülönbségek (φ) esetén. Az alkalmazott térerősség $E_0 = 0.06$ a.u..

kezdeti impulzusa a (3.5.11) stacionárius trajektóriák inflexióspontjára vonatkozó összefüggés alapján kiszámítható, így az ionizációs trajektória minden paramétere közelítőleg megkapható. A rekonstruált értékek jó összhangban vannak kísérleti eredményekkel [136, 127].

3.6. A fejezetben bemutatott eredmények összefoglalása

Ebben a fejezetben az erős lézertérben játszódó ionizáció klasszikus és kvantumdinamikáját vizsgáltuk. A modellként szolgáló hidrogén atom kezdetben alapállapotban lévő elektronja és egy intenzív, ultrarövid, csupán néhány optikai ciklust tartalmazó, infravörös lézerimpulzus kölcsönhatását tanulmányoztuk.

A leírandó fizikai folyamat jellegzetesen kvantummechanikai természetű, amelynek nincs megfelelője a klasszikus mechanikában, ezért először a jelenség kvantummechanikai szimulációját végeztük el. Azért, hogy a folyamathoz egy jól használható, intuitív, klasszikus képet társíthassunk, az analízist a fázistéren végeztük el a Wigner-függvény segítségével. Megállapítottuk, hogy az elektron iontörzstől történő eltávolodása egy időben és a fázistéren elkent folyamat, illetve hogy a különböző csatornák, az alagúteffektus és a potenciálgát feletti ionizáció kvantuminterferenciája jelentős. Ezt az észrevételünket az elektron hullámfüggvényének energia szerinti felbontása, valamint az ebből számolt egyes ionizációs csatornákhöz tartozó áramsűrűség és kvantummomentum függvény vizsgálata is alátámasztotta. Továbbá az áramsűrűség és a kvantummomentum analíziséből azt a következtetést vontuk le, hogy az elektron kilépési folyamatában mind a

széles energiatartományra számított alagúteffektus, mind a potenciálgát feletti ionizáció egyaránt fontos szerepet játszik, viszont a szokásos „éles” energiaérték-nél történő alagúteffektus járuléka elhanyagolható.

A kvantummechanikai analízis tanulságai alapján új típusú klasszikus trajektóriákat javasoltunk a folyamat leírására. Ezek a trajektóriák az adott időpillanatban vett potenciális energiához tartozó olyan stacionárius trajektória inflexiós pontjából indulnak, amit a kvantummomentum függvény éppen ebben az inflexióspontban metsz. Tehát az elektron klasszikus dinamikája nem feltétlenül a lézerimpulzus maximális térerősségénél indul, és nullától különböző kezdeti impulzussal rendelkezik. Továbbá, mivel a trajektóriákhoz tartozó kezdeti energia a potenciálgát feletti ionizáció tartományába esik, minden további feltételezés nélkül teljesíti az energiamegmaradást. Megfigyelhettük, hogy ezzel a kezdőfeltétellel a különböző kezdeti időpillanathoz tartozó trajektóriákon haladó elektronok a teljes időfejlődés során közel esnek a kvantummomentum függvényéhez, ami alapján megállapítható, hogy jól reprezentálják a kvantumdinamikát. Még inkább az ionizáció folyamatára fókuszálva összevetettük az általunk bevezetett klasszikus trajektóriákat a kölcsönhatás végén pozitív energiás és pozitív impulzusú hullámcsomag Wigner-függvényével. Láthattuk, hogy a trajektóriák alkalmasan megválasztott, különböző kezdeti időpillanathoz tartozó csoportja jól lefedi az ionizálódó hullámcsomagot, mindemellett az a tény, hogy nem tudunk egyetlen kitüntetett trajektóriát rendelni a folyamathoz magában hordozza a kvantummechanika valószínűségi tulajdonságát.

Végül egy egyszerű iteratív módszert adtunk arra, hogy a direkt ionizálódott elektron detektoron mért impulzusából, hogyan lehet az általunk javasolt trajektóriákon történő klasszikus propagáció kezdeti időpillanatát, koordinátáját és ezek alapján kezdeti impulzusát rekonstruálni. A módszert numerikus kísérlet segítségével teszteltük is, amely alapján igen hatékonyak bizonyult. Több térerősség és vivő burkoló fáziskülönbség érték esetén is a kezdeti időpillanat rekonstrukció legnagyobb eltérése kb. 50 as volt, míg a valószínűbb trajektóriák esetén ez 5 as vagy még kevesebb, míg a kezdeti pozíció esetén az eltérés nagyságrendileg a Bohr-sugár tizede.

A fenteik alapján az alábbi tézispontokban fogalmazom meg új tudományos eredményeimet.

4. Új típusú klasszikus trajektória bevezetése az erős-teres ionizáció közelítő leírására [T4]

Atom és erős lézertér kölcsönhatásakor az atomi potenciálból „kiszabaduló” elektron közelítő leírására újfajta kezdőfeltétellel rendelkező klasszikus trajektóriákat

vezettem be. Ezek kezdőfeltételeit a teljes kölcsönhatást leíró pillanatnyi potenciálfüggvényhez tartozó olyan stacionárius trajektória inflexiós pontja szolgáltatja, amit az adott időpillanatbeli kvantummomentum függvény éppen az inflexiós pontban metsz. Az atomi potenciálból kiszabadult elektront leíró hullámcsomag Wigner-függvényével és a kvantummomentum függvénnyel történő összevetés alapján megállapítottam, hogy az általam bevezetett trajektóriák az összetett kvantummechanikai folyamat helyes klasszikus reprezentációját adják. Továbbá, a kezdeti időpillanat függvényében számot adnak mind a direkt ionizációról, mind az újraszóródásról. Megállapítottam, hogy a trajektórián haladó klasszikus elektron kezdeti energiája a potenciálgát feletti ionizáció tartományába esik, ami feloldja és megmagyarázza a nem-nulla kezdőimpulzus problémáját a szokásos alagúteffektust feltételező modellekben.

5. Rekonstrukciós eljárás a direkt ionizálódott elektron klasszikus kezdeti paramétereinek meghatározására [T4]

Felhasználva az általam bevezetett fenti trajektóriákat egy iteratív eljárást javasoltam arra, hogy a direkt (azaz újraszóródás nélkül) ionizálódott elektron detektoron mért impulzusértékéből hogyan lehet rekonstruálni a klasszikus trajektória kezdeti időpillanatát, helykoordinátáját, majd ezekből az adatokból az impulzusát. Az általam javasolt eljárást numerikus kísérlet segítségével teszteltem a számításba jöhető kezdeti időpontok intervallumára, különböző lézerintenzitás és vivő-burkoló fáziskülönbség értékek esetén. Megállapítottam, hogy a módszer legfeljebb kb. 2 atomi időegység (kb. 50 as) eltéréssel adja meg a klasszikus trajektória kezdeti időpillanatát, azonban a valószínűbb trajektóriák esetén az eltérés kevesebb, mint 5 as, a kezdeti pozícióra pedig kevesebb, mint a Bohr-sugár egytizede (5 pm).

Összefoglalás és tézisek

Bevezetés

Az atomokban, molekulákban lejátszódó ultragyors folyamatok valós időben történő vizsgálata mára rutinszerűen végezhető a világ vezető laboratóriumaiban [2, 3], egyszersmind a fizika egyik leggyorsabban fejlődő tudományterületévé vált [4, 5]. Jelen értekezés írásakor ultragyorsnak azokat a folyamatokat tekintjük, amelyek karakterisztikus időskálája a száz attoszekundum (as) nagyságrendjébe esik. Ezek a folyamatok, amelyek legtöbb esetben az atom vagy molekula elektronrendszerének dinamikájával vannak kapcsolatban, jelentik jelenleg a mérési időtartomány alsó határát.

A fény-anyag kölcsönhatáson alapuló legkorszerűbb, legfinomabb időfelbontással rendelkező mérési eljárások az ún. pumpa-próba elven működnek, amelyek 50-100 as időtartamú dinamikai folyamatokat képesek feloldani [7, 8]. Ennek elengedhetetlen része a tipikusan extrém ultraibolya – lágy röntgen spektrális tartományban lévő attoszekundumos fényimpulzus keltés, amely általában nemesgáz atomokon történő magasrendű harmonikus-keltéssel valósul meg [33, 34, 6]. Ennek a módszernek, a másodlagos sugárforrás sajátosságai miatt, egyrészt megvannak a maga korlátai az emittált fényimpulzus intenzitására és hullámhosszára vonatkoztatva. Másrészt jól ismert tény, hogy ezekben az úttörő kísérletekben is alkalmazott, néhány-ciklusos, femtoszekundumos lézerimpulzusok vivő-burkoló fáziskülönbsége a vizsgált időskálán befolyásolja az atomi- vagy molekuláris rendszerek különféle folyamatait. A közelmúltban azonban kimutatták, hogy ezekben a pumpa-próba kísérletekben jelentős szerepe lehet az attoszekundumos fényimpulzusok vivő-burkoló fáziskülönbségének is [92, 94].

Az erős lézertérben lejátszódó ionizáció alapvető szerepet játszik az attoszekundumos fizikában. Egy megfelelően erős lézerimpulzus lehetővé teszi az elektron számára, általában alagúteffektust feltételezve, hogy az atomi kötött állapotából kiszabaduljon, ami a széles körben ismert háromlépéses modell első lépése [35, 36, 42]: (i) az elektron optikai alagúteffektussal kiszabadul az atomi Coulombpotenciálból, (ii) klasszikus dinamikával jól közelíthető mozgás során kinetikus energiát nyer a lézertérből, (iii) végül megfelelő körülmények között visszatér az

iontörzshöz és rekombinálódik vele, aminek eredményeképpen ultraibolya sugárzást bocsát ki. Ez az elméleti modell alapozza meg a folyamatról alkotott fizikai képünket. Jelenleg az elektron alagutazási idejének és a kezdeti impulzusának problémája kiemelkedő jelentőségű mind a kvantumelmélet, mind az attoszekundumos méréstechnika szempontjából [101].

Célkitűzés

Az értekezésben bemutatott doktori munka célja az attoszekundumos fényimpulzus keltéssel és a használatban lévő elméleti modellekkel kapcsolatos még nyitott kérdések vizsgálata, és ezek közül néhány megválaszolása volt.

Ahogy az előző szakaszban említettük a nemesgáz atomokon magasrendű harmonikus-keltéssel történő attoszekundumos fényimpulzus előállításnak megvannak a maga fizikai korlátai a nemesgáz atomok, azaz a másodlagos sugárforrások tulajdonságai miatt. Éppen ezért természetesen adódott a motivációnk új, alternatív módszer keresésére. A nemesgáz atomokon történő felharmonikus-keltés egyik fő problémája, hogy az általuk létrehozott attoszekundumos fényimpulzus maximális intenzitása limitált: az atomokból vagy molekulákból álló mintán sem lehet akármilyen nagy intenzitású lézerimpulzust alkalmazni, hiszen a túl intenzív lézertér ionizálja a gázt, így a rekombináció és az ultraibolya sugárzás kibocsátása nem valósul meg.

Régóta ismert jelenség, hogy elektromágneses sugárzás szabad, nagy sebességre gyorsított elektronon történő szóródásakor, amelyet az energetikai viszonyok alapján Thomson- vagy Compton-szórásnak nevezünk, a szórt sugárzásban megjelennek a lézertér központi frekvenciájánál jóval nagyobb frekvenciájú komponensek is [55, 56, 57, 58]. Az is tudott, hogy sok részecskét tartalmazó elektroncsomag megfelelő kísérleti körülmények között koherens sugárzás kibocsátására képes, amit korábban mono-energetikus sugárzás előállítására használtak [62, 63]. Erre a két megállapításra, valamint az elektron nano-csomagokkal kapcsolatos úttörő szimulációkra [64, 65] és kísérletekre [66, 67] alapozva célul tűztük ki, hogy megvizsgáljuk annak a lehetőségét, hogy megfelelő paraméterekkel rendelkező elektroncsomag és lézertér kölcsönhatása képes-e makroszkopikusan detektálható és a kísérletekben jól használható attoszekundumos fényimpulzus kibocsátására.

Az atomok vagy molekulák optikai ionizációja a hozzá kapcsolódó fundamentális fizikai kérdések miatt önmagában is érdekes jelenség. Emellett nem csak a nemesgáz atomok segítségével történő attoszekundumos fényimpulzus előállítás szempontjából fontos folyamat, hanem számos modern eszközzel végzett mérési eredmény kiértékelése és értelmezése miatt is. Ezek a mérési eljárások egyedi ionizációs eseményeket tudnak vizsgálni a belőlük származó elektronok, ionok és

egyéb fragmentumok detektálása alapján.

Célunk volt az erős lézertérben lejátszódó ionizáció mint időfüggő jelenség kvantum- és klasszikus dinamikáját vizsgálni és a két dinamikát összehasonlítani a fázistéren. Vizsgáltuk, hogy a Schrödinger-egyenlet megoldásából származó kvantumdinamikát milyen kezdeti feltételekkel rendelkező klasszikus dinamika írja le a legjobban. Továbbá, fontos és messzemenőig nem triviális kérdés, hogy egy ilyen időfüggő kvantummechanikai folyamat esetén a fázistér mely pontjától közelíthető a dinamika a klasszikus fizika eszközeivel. A klasszikus- és kvantumdinamika összevetése alapján azt a kérdést is vizsgáltuk, hogy a klasszikus dinamika determinisztikus voltát kihasználva, hogyan lehet mérhető fizikai mennyiségekből visszakövetkeztetni a kvantumdinamikát legjobban modellező klasszikus trajektória kezdeti paramétereire.

Módszerek

A fény-anyag kölcsönhatás leírására szolgáló, leggyakrabban használt elméleti modellek közül a vizsgált fizikai problémák sajátosságai miatt a klasszikus fény és klasszikus anyag, illetve a szemi-klasszikus leírást használtuk.

A relativisztikus Thomson-szórás esetén az elektron energiájának megváltozását elhanyagoljuk a fény energiájának változása mellett. Ezen fizikai probléma tárgyalásakor az elektront klasszikus fényforrásnak, a szóródó lézerteret pedig klasszikus elektromágneses mezőnek tekintettük. Így az elektron a relativisztikus Newton-Lorentz egyenletek alapján mozog a lézertér hatása alatt, és egy megfelelően távol lévő térbeli pontban az elektron által kisugárzott tér spektrális eloszlását a Liénard-Wiechert-féle potenciálokon alapuló jól ismert összefüggés segítségével kaphatjuk meg. Bár manapság egyre elterjedtebbek a numerikus módszerek a hasonló problémák kezelésére, mi mégis, amíg lehetőségünk adódott, szorítkoztunk a mozgásegyenlet egzakt, analitikus tárgyalásánál maradni, numerikus módszereket csak az elektron vagy az elektroncsomag által kisugárzott tér kiszámításakor használtunk. Amikor nem egyetlen elektron, hanem nagy számú részecskét tartalmazó, ideálisnak tekintett elektroncsomag sugárzási terét számítottuk ki, úgy tekintettük, hogy az elektronok ugyanolyan trajektórián haladnak végig, csupán a trajektóriák kezdeti értékeiben van különbség. Ezért az eredő sugárzási tér számításakor az egyetlen emittertől származó sugárzási tér spektrumát a koherencia tényezővel megszorozva megkaptuk az adott paraméterrel rendelkező elektroncsomag sugárzási terét.

Az erős-teres ionizáció összetettebb probléma, abban az értelemben, hogy a modellként szolgáló hidrogénatom elektronját klasszikus és kvantumdinamikai szempontból is le kívántuk írni. Így amikor klasszikus részecskeként vettük fi-

gyelembe, akkor megmaradtunk a korábban használt Newton-Lorentz egyenlet nem relativisztikus alakjánál, valamint annak részben analitikus, részben numerikus kezelésénél. Az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldásakor a modellként szolgáló hidrogénatom alapállapotában lévő elektron és lézertér kölcsönhatásának leírásakor dipól-közelítést és hossz-mértéket alkalmaztunk. Ezért az elektron hullámfüggvénye nem függ a polarizáció iránya körüli azimutális szögtől, a háromdimenziós Schrödinger-egyenletet célszerűen hengerkoordináta-rendszerben oldottuk meg. Így a megoldásakor egy operátor bontáson (operator splitting) alapuló hibrid Crank–Nicolson módszert alkalmaztunk [110]. A kvantummechanikai problémát, a klasszikus fizikával történő jobb összevethetőség érdekében a fázistéren vizsgáltuk a Wigner-függvény és a belőle származtatott ún. kvantummomentum függvény segítségével.

Tudományos eredmények

Az alábbiakban röviden ismertetem a disszertációban bemutatott új tudományos eredményeimet öt tézispontban összefoglalva. A megállapításaimat tartalmazó publikációkat, amelyek listája a disszertáció végén megtalálható, a tézispontok címében hivatkozom.

1. Attoszekundumos fényimpulzus előállításának lehetősége megfelelő elektroncsomagon történő Thomson-szórással [T1,T2]

Partikuláris megoldást adtam egy olyan ponttöltés relativisztikus trajektóriájára, amely kölcsönhat egy, a gyakorlatban sokszor alkalmazott, szinusz-négyzet burkolóval modellezhető lézerimpulzussal. Felhasználva az elektron analitikus trajektóriáját, kiszámoltam egy intenzív, egy-ciklusos, lineárisan polarizált, közeli infravörös lézerimpulzus által egy monoenergetikus elektron nano-csomagon Thomson-szórással létrehozott elektromágneses sugárzás spektrális eloszlását, időbeli alakját, valamint vizsgáltam a térbeli függését is. Megállapítottam, hogy egy megfelelő tulajdonságokkal rendelkező elektron-csomag spektrális szűrés nélkül, csupán a sugárzás kollektív mivoltából adódóan képes félértékszélességben egyetlen optikai ciklust tartalmazó, 16 attoszekundum impulzushosszúságú, 99 nJ energiájú fényimpulzust kisugározni. Ennek spektruma az extrém-ultraibolya-lágy-röntgen spektrális tartományba esik, és az élettudományi szempontból kiemelkedő fontosságú 2,33–4,37 nm hullámhossz közötti „víz ablakot” is tartalmazza.

2. Javaslat attoszekundumos fényimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbségének dinamikus szabályozására [T2]

Megvizsgáltam, hogy a relativisztikus Thomson-szóráskor az elektron nano-csomag által kisugárzott elektromágneses mező hogyan függ a gerjesztő femtoszekundumos lézerimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbségétől. Megállapítottam, hogy a gerjesztő lézerimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbsége és a Thomson-szórás során létrejövő attoszekundumos fényimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbsége között egyszerű, lineáris kapcsolat van, amely dinamikusan kontrollálhatóvá teszi az attoszekundumos fényimpulzus vivő-burkoló fáziskülönbségét, ami különösen fontos például a pumpa-próba kísérletek szempontjából.

3. Javaslat nagy impulzusenergiájú attoszekundumos fényimpulzus előállítására [T3]

Megállapítottam, hogy az elektron-csomagon szóródó lézerimpulzus intenzitását növelve a szórás során létrejövő attoszekundumos fényimpulzus hossza csak kis mértékben növekszik, azonban az intenzitása jelentősen, nemlineárisan nő egy bizonyos telítési értékig, amely a kölcsönhatás paramétereitől függ. Továbbá, amennyiben a bejövő lézerimpulzust fázismoduláltnak tételeztem fel, azt találtam, hogy a megfelelően megválasztott negatív fázismoduláció úgy módosítja a kisugárzott tér spektrális eloszlását, hogy az attoszekundumos fényimpulzus időbeli alakját lényegesen nem befolyásolja, azonban az energiája elérheti a μJ energiatartományt.

4. Új típusú klasszikus trajektória bevezetése az erős-teres ionizáció közelítő leírására [T4]

Atom és erős lézertér kölcsönhatásakor az atomi potenciálból „kiszabaduló” elektron közelítő leírására újfajta kezdőfeltétellel rendelkező klasszikus trajektóriákat vezettem be. Ezek kezdőfeltételeit a teljes kölcsönhatást leíró pillanatnyi potenciálfüggvényhez tartozó olyan stacionárius trajektória inflexiós pontja szolgáltatja, amit az adott időpillanatbeli kvantummomentum függvény éppen az inflexiós pontban metsz. Az atomi potenciálból kiszabadult elektront leíró hullámcsomag Wigner-függvényével és a kvantummomentum függvénnyel történő összevetés alapján megállapítottam, hogy az általam bevezetett trajektóriák az összetett kvantummechanikai folyamat helyes klasszikus reprezentációját adják. Továbbá, a kezdeti időpillanat függvényében számot adnak mind a direkt ionizációról, mind az újraszóródásról. Megállapítottam, hogy a trajektórián haladó klasszikus

elektron kezdeti energiája a potenciálgát feletti ionizáció tartományába esik, ami feloldja és megmagyarázza a nem-nulla kezdőimpulzus problémáját a szokásos alagúteffektust feltételező modellekben.

5. Rekonstrukciós eljárás a direkt ionizálódott elektron klasszikus kezdeti paramétereinek meghatározására [T4]

Felhasználva az általam bevezetett fenti trajektóriákat egy iteratív eljárást javasoltam arra, hogy a direkt (azaz újraszóródás nélkül) ionizálódott elektron detektoron mért impulzusértékéből hogyan lehet rekonstruálni a klasszikus trajektória kezdeti időpillanatát, helykoordinátáját, majd ezekből az adatokból az impulzusát. Az általam javasolt eljárást numerikus kísérlet segítségével teszteltem a számításba jöhető kezdeti időpontok intervallumára, különböző lézerintenzitás és vivő-burkoló fáziskülönbség értékek esetén. Megállapítottam, hogy a módszer legfeljebb kb. 2 atomi időegység (kb. 50 as) eltéréssel adja meg a klasszikus trajektória kezdeti időpillanatát, azonban a valószínűbb trajektóriák esetén az eltérés kevesebb, mint 5 as, a kezdeti pozícióra pedig kevesebb, mint a Bohr-sugár egytizede (5 pm).

Summary of the thesis

Introduction

Real-time studies of ultrafast processes in atoms, molecules and solids can now be routinely performed in the leading laboratories of the world [2, 3], and attosecond physics has become one of the fastest developing fields of physics [4, 5]. At the time of writing this thesis, those phenomena are considered ultra-fast processes whose characteristic time scale is in the order of hundred attoseconds (as). These processes, which in most cases are related to the dynamics of the electron system in the atom or molecule, currently represent the lower limit of measuring dynamic processes.

The state-of-the-art measurement method based on light-matter interaction is the so-called pump-probe experiment having the finest time resolution, i.e. dynamic processes of 50 to 100 as can be resolved [7, 8]. An essential part of this method is the generation of attosecond light pulses, usually in the XUV – soft X-ray spectral range, typically by high-order harmonic generation on noble gas atoms [33, 34, 6]. However, due to the characteristics of the secondary radiation source, i.e. the noble gas sample, this method has its own limitations in terms of the intensity and pulse length of the emitted light pulse. On the other hand, it is a well-known fact that the carrier-envelope phase difference (CEP) of the few-cycle, femtosecond laser pulse, involved in most of these pioneering experiments, affects various processes in atomic or molecular systems on this time scale. Recently, it has been proven that the phase difference of CEP of the attosecond light pulses is also crucial in these pump-probe experiments [92, 94].

The strong-field ionization of atoms plays a fundamental role in attosecond physics. A sufficiently strong laser pulse enables an electron to escape from its atomic bound state into the continuum; this is usually assumed to happen by tunnelling, which is the first step of the very successful three-step model [35, 36]: (i) the electron is released from the Coulomb potential of the atomic ion core by tunnelling, (ii) as a classical particle it gains kinetic energy from the laser field, (iii) the electron returns to the vicinity of the parent ion core, and under appropriate conditions they recombine while emitting ultraviolet radiation (photon).

This model underlies much of our understanding in this area. Currently, the problems of tunnelling time and exit momentum are of outstanding importance regarding both quantum theory and attosecond metrology [101].

Objectives

The objective of the work presented in this PhD thesis was to examine the open questions related to the theoretical models and the generation of attosecond light pulses, and to attempt to answer some of these questions.

As mentioned in the previous section, the method most frequently used for the generation of attosecond XUV pulses has its own physical limitations due to the properties of noble gas atoms, i.e. secondary light sources. Therefore, we were scientifically motivated to look for a new, alternative method. One of the main problems of high-harmonic generation on noble gas atoms is that the maximum intensity of the generated attosecond light pulse is limited: the intensity of the driver laser pulse must not exceed a threshold value, because a very intense laser field would ionize the gas, and therefore prohibit recombination and the emission of ultraviolet radiation.

It has been long known that when electromagnetic radiation is scattered on a free, relativistic electron (this phenomenon is called Thomson or Compton scattering depending on the energetic conditions), the scattered radiation also contains components with much higher frequencies than the central frequency of the laser field [55, 56, 57, 58]. It is also known that under appropriate experimental conditions an electron bunch containing many particles is capable of emitting coherent radiation, which was previously used to produce mono-energetic radiation [62, 63]. Based on these two findings, as well as pioneering simulations [64, 65] and experiments [66, 67] related to electron nanobunches, we aimed to investigate whether the interaction between an electron-bunch with appropriate parameters and a suitable laser pulse can emit attosecond light pulses that can be detected macroscopically and used in experiments.

The optical ionization of atoms or molecules is an interesting phenomenon due to the associated fundamental physical questions. In addition, it is an important process not only for the production of attosecond light pulses with noble gas atoms, but also for the interpretation and evaluation of measurement results obtained with modern devices. These measurement methods can detect individual ionization events based on electrons, ions and other fragments.

Our objective was to investigate the quantum and classical dynamics of ionization in a strong laser field as a time-dependent phenomenon, and to compare the two dynamics in the phase space. We examined under what initial conditions

classical dynamics approximates quantum dynamics derived from the solution of the Schrödinger equation. Furthermore, an important and far from trivial question in such a time-dependent quantum mechanical process is the following: from which point of the phase space can dynamics be considered classical? Based on the comparison of classical and quantum dynamics and using the deterministic nature of classical dynamics, we also examined the possibility of reconstructing the starting point of the classical trajectory that best models quantum dynamics from measurable physical quantities.

Methods

From among the theoretical models most frequently used for describing light-matter interactions, we opted for the classical light and classical material or the semi-classical description due to the peculiarities of the studied physical problems.

In the case of relativistic Thomson scattering, any change in electron energy is neglected compared to the change in light energy. During the discussion of this problem, we considered the electron as a classical source of electromagnetic radiation and the scattering laser field as a classical electromagnetic wave. Thus, the electron moves under the influence of the laser field according to the classical Newton-Lorentz equations, and in a sufficiently distant point in space the spectral distribution of the far-field radiated by the electron can be obtained using the well-known formula based on Liénard-Wiechert potentials. Although numerical methods for dealing with similar problems are becoming more common today, we limited ourselves to an exact, analytical solution of the equation of motion, and we used numerical methods to calculate the emitted field radiated by the electron or by the electron bunch only. When we calculated the radiation field of a so called electron bunch consisting of a large number of particles instead of a single electron, we assumed that the electrons travel along the same trajectory, they differ only in the initial trajectory coordinates. Therefore, when we calculated the electric field emitted by the electron bunch, the spectrum of the radiation field from a single emitter was multiplied by the coherence factor, to obtain the radiation field of the “ideal” electron-bunch having the assumed parameter.

Strong-field ionization is a more complex problem in the sense that we aimed to describe the electron of the hydrogen atom (which served as a model) from both the classical and quantum dynamics perspectives. Thus, when we considered the electron as a classical particle, we confined ourselves to the non-relativistic form of the previously mentioned Newton-Lorentz equation and its partly analytical and partly numerical treatment. When solving the time-dependent Schrödinger equation, we used dipole approximation for the interaction of a single active electron

atom with the classical electromagnetic field in the length gauge. The assumed linearly polarized laser pulse excited the electron from its atomic ground state. As the electron's wave function does not depend on the azimuth angle around the polarization axis, we were able to write the three-dimensional time-dependent Schrödinger equation in cylindrical coordinates. Then we used a hybrid Crank – Nicolson method based on operator splitting [110]. In order to achieve better comparability with classical physics, we investigated the quantum mechanical problem in the phase space with the Wigner function and with the so-called quantum momentum function.

Scientific results

In the following, I present a brief summary of my new scientific results discussed in the thesis and collected in five thesis statements. The publications connected to my statements are listed at the end of the dissertation and cited in the title of each thesis point.

1. The possibility of generating an attosecond light pulse by Thomson scattering on a suitable electron bunch [T1,T2]

I have given a particular solution to the relativistic trajectory of a point charge that interacts with a laser pulse described by a sine-squared envelope and often used in practice. Using the analytical trajectory of the electron, I calculated the spectral distribution and temporal dependence, and investigated the spatial dependence of electromagnetic radiation emitted by a single electron and a monoenergetic electron nanobunch during the Thomson scattering of an intense, linearly polarized, single-cycle, near-infrared laser pulse. I have found that an electron bunch with suitable properties can emit a light pulse having a pulse length of 16 attoseconds (full width at half maximum) and an energy of 99 nJ in the extreme ultraviolet–soft X-ray spectrum without any spectral filtering, due to the collective nature of the radiation. The spectrum of the attosecond light pulse includes the so called “water window” ranging from 2.33 nm to 4.37 nm, which is of great importance for life sciences.

2 Proposal for the dynamic control of the carrier-envelope phase difference of an attosecond light pulse [T2]

I investigated the dependence of the electric field radiated by the electron nanobunch on the carrier-envelope phase difference of the driving laser pulse during

relativistic Thomson scattering. I found that there is a simple linear relationship between the carrier-envelope phase difference of the driving laser pulse and the carrier-envelope phase difference of the emitted attosecond light pulse. This property of the attosecond light pulse generation process makes the carrier-envelope phase difference dynamically controllable.

3. Proposal for generating a high pulse energy attosecond light pulse [T3]

I found that any increase in the intensity of the laser pulse scattered on the electron bunch only lightly increases the length of the attosecond light pulse generated during the scattering process. However, the intensity of the light pulse increases considerably and non-linearly up to a certain saturation value, which depends on the parameters of the interaction. Furthermore, assuming a chirped incoming laser pulse I found that a properly chosen negative chirp modifies the spectral distribution of the emitted field without significantly affecting the pulse shape, but the energy of the attosecond light pulse can be increased up to the μJ energy range.

4. Introduction of a new type of classical trajectory for the approximate description of strong-field ionization [T4]

For strong-field ionization I suggested classical trajectories with improved initial conditions for the classical description of the electron liberated from the atomic potential. The initial conditions of such a trajectory are provided by the outermost inflection point of that stationary phase space trajectory of the instantaneous potential which intersects the quantum momentum function at the inflection point. When comparing the Wigner function of the escaped wave packet and the quantum momentum function, I found that a suitable set of such trajectories with different starting times gives an apparently good approximation of the quantum dynamics of the ionized wave packet, and such a set also reflects the temporally blurred feature of the liberation process. Furthermore, I found that the initial energy of the classical electron travelling on the trajectory falls in the range of over-the-barrier ionization, which solves and explains the problem of the non-zero initial momentum in models assuming traditional tunnelling.

5. Reconstruction procedure for determining the classical initial parameters of a directly ionized electron [T4]

Using the trajectories I introduced earlier, I proposed an iterative method to reconstruct the starting time and position, and then the starting momentum, of the classical trajectory from the measured momentum of a directly ionized electron (i.e. ionized without rescattering). I tested the proposed method using a numerical experiment for the range of possible starting times for different laser intensities and carrier-envelope phase difference values. I found that the method reconstructs the starting time of the classical trajectory with a maximum deviation of about 2 a.u. (ca. 50 as), however, for the more probable trajectories the deviation is less than 5 as, and for the initial position it is less than one tenth of the Bohr radius (5 pm).

Köszönetnyilvánítás

Először is szeretném hálámat kifejezni a két témavezetőm, Varró Sándor és Czirkák Attila iránt. Az ő szakmai útmutatásuk, hozzáértésük és segítőkészségük nélkül ez az értekezés nem készülhetett volna el. Mindketten már az egyetemi éveim alatt bátorítottak, hogy merüljek el a fény-anyag kölcsönhatás témakörében, mindemellett folyamatos szakmai kihívások elé állítottak.

Szeretném köszönetemet kifejezni Benedict Mihály professzornak, aki tanszékvezetőként már másodéves koromban lehetőséget biztosított, hogy becsatlakozzak az Elméleti Fizikai Tanszék munkájába, és nem sokkal később már oktatási feladatokat is rám bízott. Emellett a kvantummechanikában szerzett jártasságomat, valamint a tudományterület szeretetét az ő zseniális előadásainak köszönhetem.

Nagyon köszönöm Fehér László professzornak, az Elméleti Fizikai Tanszék jelenlegi tanszékvezetőjének, hogy oktatóként folyamatosan számít rám, valamint az ösztönző kérdéseit az értekezés elkészülte felől.

Köszönöm az ELI-ALPS minden jelenlegi és volt munkatársának, hogy megteremtették azt a barátságos és professzionális atmoszférát, ahová öröm bejárni és fizikai problémákon gondolkodni. Munkatársaim közül külön köszönöm Polner Mónikának és Mati Péternek a napi jókedvű és hatékony irodai munkát, Földi Péternek és Tóth Attilának pedig az elgondolkodtató és gyümölcsöző beszélgetéseket.

Végezetül, de nem utolsó sorban köszönöm a családomnak, hogy mellettem álltak és állnak egész életem során. Végtelenül hálás vagyok a feleségemnek, Eszternek, hogy létrehozta azt a szerető otthoni légkört, ahol az ember pihenhet és feltöltődhet.

Az ELI-ALPS projekt (GINOP-2.3.6-15-2015-00001) az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósul meg. Kutatómunkám az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg, EFOP-3.6.2-16-2017-00005: „Ultragyors fizikai folyamatok atomokban, molekulákban, nanoszerkezetekben és biológiai rendszerekben”. A munkámat a GINOP-2.3.2-15-2016-00036 számú "Multimodális optikai nanoszkópia és alkalmazásai az élet- és anyagtudományokban" című projekt is támogatta.

Publikációk

A tézispontokhoz kapcsolódó referált folyóiratcikkek:

- [T1] Sz. Hack, S. Varró and A. Czirják, „Interaction of relativistic electrons with an intense laser pulse: HHG based on Thomson scattering”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* **369**, 45-49 (2016)
- [T2] Sz. Hack, S. Varró and A. Czirják, „Carrier-envelope phase controlled isolated attosecond pulses in the nm wavelength range, based on coherent nonlinear Thomson-backscattering”, *New Journal of Physics* **20**, 073043 (2018)
- [T3] Sz. Hack, Z. Tóth, S. Varró and A. Czirják, „Isolated attosecond pulses of μJ energy via coherent Thomson-backscattering, driven by a chirped laser pulse”, *The European Physical Journal D* **73**, 77 (2019)
- [T4] 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” (*beküldve*); arXiv:2103.12699

Az értekezés témájához kapcsolódó konferenciaanyagok:

Angol nyelvű konferenciapozterek:

- Sz. Hack, Sz. Majorosi, M. Benedict and A. Czirják: *Reconstruction of tunneling time and exit momentum in strong field ionization, based on phase space methods*, 13th European Conference on Atoms, Molecules and Photons, Florence, Italy, (2019)
- Sz. Hack, Z. Tóth, S. Varró and A. Czirják: *Isolated attosecond pulses via coherent Thomson-backscattering*, 13th European Conference on Atoms, Molecules and Photons, Florence, Italy, (2019)

- Sz. Hack, S. Varró, Z. Tóth and A. Czirják: *Isolated attosecond pulses via Thomson backscattering*, MPS 2018 - The International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces, Budapest, Hungary, (2018)
- Sz. Hack, S. Varró and A. Czirják: *CEP Controlled attosecond pulse generation via nonlinear Thomson-backscattering*, Kvantumelektronika 2018: VIII. Symposium, Budapest, Hungary, (2018)
- Sz. Hack, S. Varró and A. Czirják: *CEP controlled isolated attosecond light pulses via nonlinear Thomson scattering*, ICEL 2017 - International Conference on Extreme Light, Szeged, Hungary, (2017)
- Sz. Majorosi, Sz. Hack, M. Benedict, A. Czirják, *Quantum entanglement in strong-field ionization*, 14th European International Conference on Multiphoton Processes, Budapest, Hungary, (2017)
- Sz. Hack, S. Varró and A. Czirják: *CEP controlled isolated attosecond light pulses via nonlinear Thomson scattering*, 14th European International Conference on Multiphoton Processes, Budapest, Hungary, (2017)
- S. Varró, I. Barna, Sz. Hack, and A. Czirják: *Laser-Dressed Morse Potentials: An Exact Analytic Treatment*, 12th European Conference on Atoms, Molecules and Photons, Frankfurt, Germany, (2016)
- Sz. Hack, S. Varró and A. Czirják: *Single attosecond pulse generation via nonlinear Thomson scattering*, 12th European Conference on Atoms, Molecules and Photons, Frankfurt, Germany, (2016)
- A. Czirják, Sz. Majorosi, Sz. Hack, M. G. Benedict: *Control of quantum entanglement in small atomic systems by a strong laser pulse*, ELFT Magyar Fizikus Vándorgyűlés, Szeged, Hungary, (2016)
- Sz. Hack, S. Varró and A. Czirják: *Isolated attosecond XUV – soft X-ray pulse generation via nonlinear Thomson scattering*, Ultrafast Dynamics and Time-Resolved Interactions, satellite meeting of the International Conference VUVX2016, Szeged, Hungary, (2016)
- Sz. Hack, S. Varró and A. Czirják: *Attosecond pulse generation in the XUV – soft X-ray spectral range, based on nonlinear Thomson scattering*; 3rd ELI User Workshop; Poster section, Szeged, Hungary, (2015)
- Sz. Majorosi, Sz. Hack, B. Lupsic, M. G. Benedict and A. Czirják: *Quantum features in the strong-field ionization of atoms*, 16th International

Conference on Density Functional Theory and its Applications, Debrecen, Hungary, (2015)

- Sz. Hack, S. Varró and A. Czirják: *Interaction of relativistic electrons with an intense laser pulse: HHG based on Thomson scattering*, Pipamon Workshop, Debrecen, Hungary, (2015)

Magyar nyelvű konferencia előadás:

- Sz. Hack, F. Árpás, O. Kiss, Z. Tóth, A. Czirják, S. Varró, *Attoszekundumos fényimpulzusok előállítása Thomson-szórással*, ELFT Magyar Fizikus Vándorgyűlés Sopron, Hungary (2019)

Magyar nyelvű konferencia kiadvány:

- Sz. Hack, Sz. Majorosi, M. G. Benedict, S. Varró and A. Czirják: *Egy-ciklusú, közeli infravörös lézerimpulzussal vezérelt alagutazásos ionizáció fázisteres vizsgálata*, Szimpózium a hazai kvantumelektronikai kutatások eredményeiről, Szeged, Hungary (2021)
- Sz. Majorosi, M. Benedict, Sz. Hack, A. Czirják: *Orbital angular momentum of high harmonics generated by a neon jet excited with a strong twisted laser pulse*, Szimpózium a hazai kvantumelektronikai kutatások eredményeiről, Szeged, Hungary (2021)

Magyar nyelvű konferenciapozster

- Sz. Hack, S. Varró and A. Czirják: *Izolált attoszekundumos impulzus előállítása nemlineáris Thomson-szórással*, ELFT Magyar Fizikus Vándorgyűlés, Szeged, Hungary, (2016)

Irodalomjegyzék

- [1] T. H. Maiman, „Stimulated optical radiation in ruby,” *Nature* **187**(4736), pp. 493–494, 1960.
- [2] M. Hentschel, R. Kienberger, C. Spielmann, G. A. Reider, N. Milosevic, T. Brabec, P. Corkum, U. Heinzmann, M. Drescher, and F. Krausz, „Attosecond metrology,” *Nature* **414**, pp. 509–513, 2001.
- [3] G. Sansone, E. Benedetti, F. Calegari, C. Vozzi, L. Avaldi, R. Flammini, L. Poletto, P. Villoresi, C. Altucci, R. Velotta, S. Stagira, S. D. Silvestri, and M. Nisoli, „Isolated single-cycle attosecond pulses,” *Science* **314**, pp. 443–446, 2006.
- [4] P. B. Corkum and F. Krausz, „Attosecond science,” *Nature Physics* **3**, pp. 381 – 387, 2007.
- [5] F. Krausz and M. Ivanov, „Attosecond physics,” *Review of Modern Physics* **81**, pp. 163–234, 2009.
- [6] F. Ferrari, F. Calegari, M. Lucchini, C. Vozzi, S. Stagira, G. Sansone, and M. Nisoli, „High-energy isolated attosecond pulses generated by above-saturation few-cycle fields,” *Nature Photonics* **4**, pp. 875–879, 2010.
- [7] E. Goulielmakis, Z.-H. Loh, A. Wirth, R. Santra, N. Rohringer, V. S. Yakovlev, S. Zherebtsov, T. Pfeifer, A. M. Azzeer, M. F. Kling, S. R. Leone, and F. Krausz, „Real-time observation of valence electron motion,” *Nature* **466**, pp. 739–743, 2010.
- [8] M. Schultze, M. Fieß, N. Karpowicz, J. Gagnon, M. Korbman, M. Hofstetter, S. Neppl, A. L. Cavalieri, Y. Komninos, T. Mercouris, C. A. Nicolaides, R. Pazourek, S. Nagele, J. Feist, J. Burgdörfer, A. M. Azzeer, R. Ernstorfer, R. Kienberger, U. Kleineberg, E. Goulielmakis, F. Krausz, and V. S. Yakovlev, „Delay in photoemission,” *Science* **328**(5986), pp. 1658–1662, 2010.

-
- [9] D. Strickland and G. Mourou, „Compression of amplified chirped optical pulses,” *Optics Communications* **56**, pp. 219–221, 1985.
- [10] R. P. Huebener, *Electrons in Action: Roads to Modern Computers and Electronics*, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, 2005.
- [11] A. H. Zewail, *Femtochemistry: Ultrafast Dynamics of the Chemical Bond*, World Scientific Publishing Company, 1994.
- [12] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, Wiley New York, 4th ed., 1999.
- [13] L. D. Landau and E. M. Lifsic, *The Classical Theory of Fields*, vol. 2 of *Course of Theoretical Physics*, Pergamon, fourth ed., 1975.
- [14] R. Abrines and I. C. Percival, „A generalized correspondence principle and proton-hydrogen collisions,” *Proceedings of the Physical Society* **88**, p. 873, 1966.
- [15] R. Abrines and I. C. Percival, „Classical theory of charge transfer and ionization of hydrogen atoms by protons,” *Proceedings of the Physical Society* **88**, p. 861, 1966.
- [16] G. H. Peslherbe, H. Wang, and W. L. Hase, *Monte Carlo Sampling for Classical Trajectory Simulations*, pp. 171–201. John Wiley & Sons, Ltd, 1999.
- [17] C. Verma, H. Lgaz, D. Verma, E. E. Ebenso, I. Bahadur, and M. Quraishi, „Molecular dynamics and monte carlo simulations as powerful tools for study of interfacial adsorption behavior of corrosion inhibitors in aqueous phase: A review,” *Journal of Molecular Liquids* **260**, pp. 99 – 120, 2018.
- [18] T. D. Sewell and D. L. Thompson, „Classical trajectory methods for polyatomic molecules,” *International Journal of Modern Physics B* **11**(09), pp. 1067–1112, 1997.
- [19] M. Christen and W. F. van Gunsteren, „On searching in, sampling of, and dynamically moving through conformational space of biomolecular systems: A review,” *Journal of Computational Chemistry* **29**(2), pp. 157–166, 2008.
- [20] N. I. Shvetsov-Shilovski, M. Lein, L. B. Madsen, E. Räsänen, C. Lemell, J. Burgdörfer, D. G. Arbó, and K. Tőkési, „Semiclassical two-step model for strong-field ionization,” *Physical Review A* **94**, p. 013415, 2016.
- [21] M. W. Evans and F. H. Harlow, „The particle-in-cell method for hydrodynamic calculations,” 1957.

- [22] A. Birdsall, C.K; Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation*, Series in Plasma Physics and Fluid Dynamics, CRC Press, 2004.
- [23] J. M. Dawson, „Particle simulation of plasmas,” *Review of Modern Physics* **55**, pp. 403–447, 1983.
- [24] K. Schmid, L. Veisz, F. Tavella, S. Benavides, R. Tautz, D. Herrmann, A. Buck, B. Hidding, A. Marcinkevicius, U. Schramm, M. Geissler, J. Meyer-ter Vehn, D. Habs, and F. Krausz, „Few-cycle laser-driven electron acceleration,” *Physical Review Letters* **102**, p. 124801, 2009.
- [25] D. Guénot, D. Gustas, A. Vernier, B. Beaurepaire, F. Böhle, M. Bocoum, M. Lozano, A. Jullien, R. Lopez-Martens, A. Lifschitz, and J. Faure, „Relativistic electron beams driven by khz single-cycle light pulses,” *Nature Photonics* **11**, pp. 293–296, 2017.
- [26] P. Meystre and M. Sargent, *Elements of quantum optics*, Springer, 4th ed., 2007.
- [27] G. Grynberg, A. Aspect, and C. Fabre, *Introduction to Quantum Optics: From the Semi-classical Approach to Quantized Light*, Cambridge University Press, 2010.
- [28] W. Press, S. Teukolsky, W. Vetterling, and B. Flannery, *Numerical recipes in C: the art of scientific computing*, Cambridge University Press, 2nd ed ed., 1997.
- [29] M. Göppert-Mayer, „Über elementarakte mit zwei quantensprüngen,” *Annalen der Physik* **401**(3), pp. 273–294, 1931.
- [30] W. Kaiser and C. G. B. Garrett, „Two-photon excitation in $\text{CaF}_2: \text{Eu}^{2+}$,” *Physical Review Letters* **7**, pp. 229–231, 1961.
- [31] I. D. Abella, „Optical double-photon absorption in cesium vapor,” *Physical Review Letters* **9**, pp. 453–455, 1962.
- [32] S. Mukamel and J. Jortner, „Multiphoton molecular dissociation in intense laser fields,” *The Journal of Chemical Physics* **65**(12), pp. 5204–5225, 1976.
- [33] M. Ferray, A. L’Huillier, X. Li, G. Mainfray, and M. C., „Multiple-harmonic conversion of 1064 nm radiation in rare gases,” *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **21**, pp. 31–35, 1988.

- [34] G. Farkas and C. Tóth, „Proposal for attosecond light pulse generation using laser-induced multiple harmonic conversion processes in rare gases,” *Physics Letters A* **168**, p. 447, 1992.
- [35] P. Corkum, „Plasma perspective on strong-field multiphoton ionization,” *Physical Review Letters* **71**, p. 1994, 1993.
- [36] M. Lewenstein, P. Balcou, M. Y. Ivanov, A. L’Huillier, and P. B. Corkum, „Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields,” *Physical Review A* **49**, pp. 2117–2132, 1994.
- [37] P. Agostini, F. Fabre, G. Mainfray, G. Petite, and N. K. Rahman, „Free-free transitions following six-photon ionization of xenon atoms,” *Physical Review Letters* **42**, pp. 1127–1130, 1979.
- [38] M. Bashkansky, P. H. Bucksbaum, and D. W. Schumacher, „Asymmetries in above-threshold ionization,” *Physical Review Letters* **60**, pp. 2458–2461, 1988.
- [39] L. V. Keldysh, „Ionization in the field of a strong electromagnetic wave,” *Sov. Phys. JETP* **20**, p. 1307, 1965.
- [40] M. Protopapas, C. H. Keitel, and P. L. Knight, „Atomic physics with super-high intensity lasers,” *Reports on Progress in Physics* **60**, pp. 389–486, 1997.
- [41] D. M. Volkov, „Über eine klasse von lösungen der diracschen gleichung,” *Zeitschrift für Physik* **94**(3), pp. 250–260, 1935.
- [42] S. Varró and F. Ehlotzky, „A new integral equation for treating high-intensity multiphoton processes,” *Nouvo Cimento* **15 D**, pp. 1371–1396, 1993.
- [43] G. Floquet, „Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques,” *Annales scientifiques de l’École Normale Supérieure* **12**, pp. 47–88, 1883.
- [44] E. P. Wigner, „On the quantum correction for thermodynamic equilibrium,” *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics* **40**, p. 749, 1932.
- [45] O. T. Serimaa, J. Javanainen, and S. Varró, „Gauge-independent Wigner functions: General formulation,” *Physical Review A* **33**, pp. 2913–2927, 1986.

- [46] J. Javanainen, S. Varró, and O. T. Serimaa, „Gauge-independent Wigner functions. ii. inclusion of radiation reaction,” *Physical Review A* **35**, pp. 2791–2805, 1987.
- [47] S. Varró and J. Javanainen, „Gauge-invariant relativistic wigner functions,” *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics* **5**, pp. S402–S406, jun 2003.
- [48] M. O. Scully and M. S. Zubairy, *Quantum Optics*, Cambridge University Press, 1997.
- [49] C. Gerry and P. Knight, *Introductory Quantum Optics*, Cambridge University Press, 2004.
- [50] M. Brune, F. Schmidt-Kaler, A. Maali, J. Dreyer, E. Hagley, J. M. Raimond, and S. Haroche, „Quantum rabi oscillation: A direct test of field quantization in a cavity,” *Physical Review Letters* **76**, pp. 1800–1803, 1996.
- [51] S. Haroche and J.-M. Raimond, *Exploring the Quantum: Atoms, Cavities, and Photons*, Oxford University Press, 2006.
- [52] N. Tsatrafyllis, I. Kominis, I. Gonoskov, and P. Tzallas, „High-order harmonics measured by the photon statistics of the infrared driving-field exiting the atomic medium,” *Nature Communications* **8**, p. 15170, 2017.
- [53] N. Tsatrafyllis, S. Kühn, M. Dumergue, P. Foldi, S. Kahaly, E. Cormier, I. A. Gonoskov, B. Kiss, K. Varju, S. Varro, and P. Tzallas, „Quantum optical signatures in a strong laser pulse after interaction with semiconductors,” *Physical Review Letters* **122**, p. 193602, 2019.
- [54] J. J. Thomson, *Conduction of electricity through gases*, Cambridge University Press, 1903.
- [55] E. S. Sarachik and G. T. Schappert, „Classical theory of the scattering of intense laser radiation by free electrons,” *Physical Review D* **1**, pp. 2738–2753, 1970.
- [56] E. Esarey, S. K. Ride, and P. Sprangle, „Nonlinear Thomson scattering of intense laser pulses from beams and plasmas,” *Physical Review E* **48**, p. 3003, 1993.
- [57] S. Chen, A. Maksimchuk, and D. Umstadter, „Experimental observation of relativistic nonlinear Thomson scattering,” *Nature* **396**, pp. 653–655, 1998.

- [58] Y. Y. Lau, F. He, D. P. Umstadter, and R. Kowalczyk, „Nonlinear Thomson scattering: A tutorial,” *Physics of Plasmas* **10**(5), pp. 2155–2162, 2003.
- [59] S. G. Rykovanov, C. G. R. Geddes, J.-L. Vay, C. B. Schroeder, E. Esarey, and W. P. Leemans, „Quasi-monoenergetic femtosecond photon sources from Thomson scattering using laser plasma accelerators and plasma channels,” *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **47**, p. 234013, 2014.
- [60] K. Lee, Y. H. Cha, M. S. Shin, B. H. Kim, and D. Kim, „Relativistic nonlinear Thomson scattering as attosecond x-ray source,” *Physical Review E* **67**, p. 026502, 2003.
- [61] W. Yan, C. Fruhling, G. Golovin, D. Haden, J. Luo, P. Zhang, B. Zhao, J. Zhang, C. Liu, M. Chen, S. Chen, S. Banerjee, and D. Umstadter, „High-order multiphoton Thomson scattering,” *Nature Photonics* **11**(8), pp. 514–520, 2017.
- [62] G. Sarri, D. J. Corvan, W. Schumaker, J. M. Cole, A. Di Piazza, H. Ahmed, C. Harvey, C. H. Keitel, K. Krushelnick, S. P. D. Mangles, Z. Najmudin, D. Symes, A. G. R. Thomas, M. Yeung, Z. Zhao, and M. Zepf, „Ultrahigh brilliance multi-mev gamma-ray beams from nonlinear relativistic Thomson scattering,” *Physical Review Letters* **113**(22), p. 224801, 2014.
- [63] K. Khrennikov, J. Wenz, A. Buck, J. Xu, M. Heigoldt, L. Veisz, and S. Karsch, „Tunable all-optical quasimonochromatic Thomson x-ray source in the nonlinear regime,” *Physical Review Letters* **114**(19), p. 195003, 2015.
- [64] N. Naumova, I. Sokolov, J. Nees, A. Maksimchuk, V. Yanovsky, and G. Mourou, „Attosecond electron bunches,” *Phys. Rev. Lett.* **93**, p. 195003, 2004.
- [65] A. Sell and F. X. Kärtner, „Attosecond electron bunches accelerated and compressed by radially polarized laser pulses and soft-x-ray pulses from optical undulators,” *Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics* **47**, p. 015601, 2014.
- [66] C. G. R. Geddes, C. Toth, J. van Tilborg, E. Esarey, C. B. Schroeder, D. Bruhwiler, C. Nieter, J. Cary, and W. P. Leemans, „High-quality electron beams from a laser wakefield accelerator using plasma-channel guiding,” *Nature* **431**, pp. 538–541, 2004.
- [67] C. M. S. Sears, E. Colby, R. Ischebeck, C. McGuinness, J. Nelson, R. Noble, R. H. Siemann, J. Spencer, D. Walz, T. Plettner, and R. L. Byer, „Pro-

- duction and characterization of attosecond electron bunch trains,” *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* **11**, p. 061301, 2008.
- [68] W. Luo, T. P. Yu, M. Chen, Y. M. Song, Z. C. Zhu, Y. Y. Ma, and H. B. Zhuo, „Generation of bright attosecond x-ray pulse trains via Thomson scattering from laser-plasma accelerators,” *Optics Express* **22**(26), pp. 32098–32106, 2014.
- [69] J. Zhu, R. W. Assmann, M. Dohlus, U. Dorda, and B. Marchetti, „Sub-fs electron bunch generation with sub-10-fs bunch arrival-time jitter via bunch slicing in a magnetic chicane,” *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* **19**, p. 054401, 2016.
- [70] J. Maxson, D. Cesar, G. Calmasini, A. Ody, P. Musumeci, and D. Alesini, „Direct measurement of sub-10 fs relativistic electron beams with ultralow emittance,” *Physical Review Letters* **118**, p. 154802, 2017.
- [71] K. Schmid, A. Buck, C. M. S. Sears, J. M. Mikhailova, R. Tautz, D. Herrmann, M. Geissler, F. Krausz, and L. Veisz, „Density-transition based electron injector for laser driven wakefield accelerators,” *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* **13**, p. 091301, 2010.
- [72] A. Buck, M. Nicolai, K. Schmid, C. M. S. Sears, A. Sävert, J. M. Mikhailova, F. Krausz, M. C. Kaluza, and L. Veisz, „Real-time observation of laser-driven electron acceleration,” *Nature Physics* **7**, pp. 543–548, 2011.
- [73] A. Buck, J. Wenz, J. Xu, K. Khrennikov, K. Schmid, M. Heigoldt, J. M. Mikhailova, M. Geissler, B. Shen, F. Krausz, S. Karsch, and L. Veisz, „Shock-front injector for high-quality laser-plasma acceleration,” *Physical Review Letters* **110**, p. 185006, 2013.
- [74] M. Heigoldt, A. Popp, K. Khrennikov, J. Wenz, S. W. Chou, S. Karsch, S. I. Bajlekov, S. M. Hooker, and B. Schmidt, „Temporal evolution of longitudinal bunch profile in a laser wakefield accelerator,” *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* **18**, p. 121302, 2015.
- [75] J. Bergou, S. Varro, G. Farkas, and M. V. Fedorov, „Absorption and stimulated radiation of quanta of an external inhomogeneous electromagnetic field of free electrons,” *Zhurnal Eksperimentalnoi i Teoreticheskoi Fiziki* **85**, pp. 57–69, July 1983.
- [76] C. A. Brau, „Oscillations in the spectrum of nonlinear Thomson-backscattered radiation,” *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* **7**, p. 020701, 2004.

- [77] A. A. Gonoskov, A. V. Korzhimanov, A. V. Kim, M. Marklund, and A. M. Sergeev, „Ultrarelativistic nanoplasmonics as a route towards extreme-intensity attosecond pulses,” *Physical Review E* **84**, p. 046403, 2011.
- [78] O. E. Vais, S. G. Bochkarev, and V. Y. Bychenkov, „Nonlinear thomson scattering of a relativistically strong tightly focused ultrashort laser pulse,” *Plasma Physics Reports* **42**(9), pp. 818–833, 2016.
- [79] G. A. Schott, *Electromagnetic Radiation*, Cambridge University Press, 1912.
- [80] N. D. Sengupta, „On the scattering of electromagnetic waves by free electron - i. classical theory,” *Bulletin of the American Mathematical Society* **41**, pp. 187–198, 1949.
- [81] E. M. McMillan, „The origin of cosmic rays,” *Physics Letters* **79**, pp. 498–501, 1950.
- [82] I. I. Goldman, „Intensity effects in compton scattering,” *Physics Letters* **8**, pp. 103–106, 1964.
- [83] S. Varró and F. Ehlotzky, „Thomson scattering in strong external fields,” *Zeitschrift für Physik D, Atoms, Molecules and Clusters* **22**, pp. 619–628, 1992.
- [84] M. Chen, E. Esarey, C. G. R. Geddes, C. B. Schroeder, G. R. Plateau, S. S. Bulanov, S. Rykovanov, and W. P. Leemans, „Modeling classical and quantum radiation from laser-plasma accelerators,” *Physical Review Special Topics - Accelerators and Beams* **16**, p. 030701, 2013.
- [85] S. Corde, K. Ta Phuoc, G. Lambert, R. Fitour, V. Malka, A. Rousse, A. Beck, and E. Lefebvre, „Femtosecond x rays from laser-plasma accelerators,” *Review of Modern Physics* **85**, pp. 1–48, 2013.
- [86] V. V. Kulagin, V. A. Cherepenin, M. S. Hur, and H. Suk, „Theoretical investigation of controlled generation of a dense attosecond relativistic electron bunch from the interaction of an ultrashort laser pulse with a nanofilm,” *Physical Review Letters* **99**, p. 124801, Sep 2007.
- [87] J.-X. Li, K. Z. Hatsagortsyan, B. J. Galow, and C. H. Keitel, „Attosecond gamma-ray pulses via nonlinear compton scattering in the radiation-dominated regime,” *Physical Review Letters* **115**, p. 204801, 2015.

- [88] L. J. Wong, B. Freelon, T. Rohwer, N. Gedik, and S. G. Johnson, „All-optical three-dimensional electron pulse compression,” *New Journal of Physics* **17**(1), p. 013051, 2015.
- [89] M. Nisoli, P. Decleva, F. Calegari, A. Palacios, and F. Martin, „Attosecond electron dynamics in molecules,” *Chemical Reviews* **117**(16), pp. 10760–10825, 2017.
- [90] A. Baltuska, T. Udem, M. Uiberacker, M. Hentschel, E. Goulielmakis, C. Gohle, R. Holzwarth, V. S. Yakovlev, A. Scrinzi, T. W. Hänsch, and F. Krausz, „Attosecond control of electronic processes by intense light fields,” *Nature* **421**, pp. 611–615, 2003.
- [91] M. Krüger, M. Schenk, and P. Hommelhoff, „Attosecond control of electrons emitted from a nanoscale metal tip,” *Nature* **475**, pp. 78–81, 2011.
- [92] L.-Y. Peng and A. F. Starace, „Attosecond pulse carrier-envelope phase effects on ionized electron momentum and energy distributions,” *Physical Review A* **76**, p. 043401, 2007.
- [93] C. Liu, M. Reduzzi, A. Trabattoni, A. Sunilkumar, A. Dubrouil, F. Calegari, M. Nisoli, and G. Sansone, „Carrier-envelope phase effects of a single attosecond pulse in two-color photoionization,” *Physical Review Letters* **111**, p. 123901, 2013.
- [94] Z. Tibai, G. Tóth, M. I. Mechler, J. A. Fülöp, G. Almási, and J. Hebling, „Proposal for carrier-envelope-phase stable single-cycle attosecond pulse generation in the extreme-ultraviolet range,” *Physical Review Letters* **113**, p. 104801, 2014.
- [95] J. R. Klauder, A. C. Price, S. Darlington, and W. J. Albersheim, „The theory and design of chirp radars,” *The Bell System Technical Journal* **39**(4), pp. 745–808, 1960.
- [96] G. A. Mourou, T. Tajima, and S. V. Bulanov, „Optics in the relativistic regime,” *Review of Modern Physics* **78**, pp. 309–371, 2006.
- [97] F. Hund, „Zur Deutung der Molekelspektren. i,” *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **40**, pp. 742–764, 1927.
- [98] L. M. M. Leontowitsch, „Zur Theorie der Schrödingerschen Gleichung,” *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **47**, pp. 131–136, 1928.
- [99] G. Gamow, „Zur Quantentheorie des Atomkernes,” *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* **51**, pp. 204–212, 1928.

- [100] R. W. Gurney and E. U. Condon, „Wave mechanics and radioactive disintegration,” *Nature* **122**, pp. 439–439, 9 1928.
- [101] A. S. Landsman and U. Keller, „Attosecond science and the tunnelling time problem,” *Physics Reports* **547**, pp. 1 – 24, 2015.
- [102] R. Landauer and T. Martin, „Barrier interaction time in tunneling,” *Review of Modern Physics* **66**, pp. 217–228, 1 1994.
- [103] P. Eckle, M. Smolarski, P. Schlup, J. Biegert, A. Staudte, M. Schöffler, H. G. Muller, R. Dörner, and U. Keller, „Attosecond angular streaking,” *Nature Physics* **4**, 2008.
- [104] P. Eckle, A. N. Pfeiffer, C. Cirelli, A. Staudte, R. Dörner, H. G. Muller, M. Büttiker, and U. Keller, „Attosecond ionization and tunneling delay time measurements in helium,” *Science* **322**(5907), pp. 1525–1529, 2008.
- [105] C. Hofmann, A. S. Landsman, and U. Keller, „Attoclock revisited on electron tunnelling time,” *Journal of Modern Optics* , 04 2019.
- [106] S. V. Popruzhenko, „Keldysh theory of strong field ionization: history, applications, difficulties and perspectives,” *Journal of Physics B Atomic Molecular and Optical Physics* **47**, p. 204001, 2014.
- [107] M. V. Ammosov, N. B. Delone, and V. P. Krainov, „Tunnel ionization of complex atoms and of atomic ions in an alternating electromagnetic field,” *Sov. Phys. JETP* **64**, p. 1191, 1986.
- [108] A. M. Perelomov, V. S. Popov, and M. V. Terentev, „Ionization of atoms in an alternating electric field,” *Sov. Phys. JETP* **23**, p. 924, 1966.
- [109] G. Yudin and M. Ivanov, „Nonadiabatic tunnel ionization: Looking inside a laser cycle,” *Physical Review A* **64**, p. 13409, 2001.
- [110] S. Majorosi and A. Czirják, „Fourth order real space solver for the time-dependent Schrödinger equation with singular Coulomb potential,” *Computer Physics Communications* **208**, pp. 9–28, 2016.
- [111] S. Majorosi, *Quantum features and advanced numerical modeling of strong-field ionization*. PhD thesis, University of Szeged, 2018.
- [112] A. Czirják, R. Kopold, W. Becker, M. Kleber, and W. Schleich, „The Wigner function for tunneling in a uniform static electric field,” *Optics communications* **179**(1), pp. 29–38, 2000.

- [113] D. Heim, W. Schleich, P. Alsing, J. P. Dahl, and S. Varro, „Tunneling of an energy eigenstate through a parabolic barrier viewed from Wigner phase space,” *Physics Letters A* **377**(31-33), pp. 1822–1825, 2013.
- [114] M. Han, P. Ge, Y. Fang, X. Yu, Z. Guo, X. Ma, Y. Deng, Q. Gong, and Y. Liu, „Unifying tunneling pictures of strong-field ionization with an improved attoclock,” *Physical Review Letters* **123**, p. 073201, 2019.
- [115] J. H. Eberly, „Schmidt analysis of pure-state entanglement,” *Laser Physics* **16**, pp. 921–926, 2006.
- [116] M. G. Benedict, J. Kovács, and A. Czirják, „Time dependence of quantum entanglement in the collision of two particles,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical* **45**(8), p. 085304, 2012.
- [117] A. Czirják, S. Majorosi, J. Kovács, and M. G. Benedict, „Emergence of oscillations in quantum entanglement during rescattering,” *Physica Scripta* **2013**(T153), p. 014013, 2013.
- [118] S. Majorosi, M. G. Benedict, and A. Czirják, „Quantum entanglement in strong-field ionization,” *Physical Review A* **96**(4), p. 043412, 2017.
- [119] E. Madelung, „Quantentheorie in hydrodynamischer Form,” *Zeitschrift für Physik* **40**, p. 332, 1927.
- [120] B. Feuerstein and U. Thumm, „On the computation of momentum distributions within wavepacket propagation calculations,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **36**(4), pp. 707–716, 2003.
- [121] H. Ni, U. Saalman, and J.-M. Rost, „Tunneling exit characteristics from classical backpropagation of an ionized electron wave packet,” *Physical Review A* **97**, p. 013426, 2018.
- [122] R. Xu, T. Li, and X. Wang, „Longitudinal momentum of the electron at the tunneling exit,” *Physical Review A* **98**, p. 053435, 2018.
- [123] S. Majorosi, M. G. Benedict, and A. Czirják, „Improved one dimensional model potentials for strong-field simulations,” *Physical Review A* **98**(2), p. 023401, 2018.
- [124] S. Majorosi, M. G. Benedict, F. Bogar, G. Paragi, and A. Czirjak, „Density-based one-dimensional model potentials for strong-field simulations in he, h-2(+), and h-2,” *Physical Review A* **101**(2), p. 023405, 2020.

- [125] A. N. Pfeiffer, C. Cirelli, A. S. Landsman, M. Smolarski, D. Dimitrovski, L. B. Madsen, and U. Keller, „Probing the longitudinal momentum spread of the electron wave packet at the tunnel exit,” *Physical Review Letters* **109**, p. 083002, 2012.
- [126] B. Wolter, M. G. Pullen, M. Baudisch, M. Sclafani, M. Hemmer, A. Senftleben, C. D. Schröter, J. Ullrich, R. Moshhammer, and J. Biegert, „Strong-field physics with mid-IR fields,” *Physical Review X* **5**(2), p. 021034, 2015.
- [127] N. Camus, E. Yakaboylu, L. Fechner, M. Klaiber, M. Laux, Y. Mi, K. Z. Hatsagortsyan, T. Pfeifer, C. H. Keitel, and R. Moshhammer, „Experimental evidence for quantum tunneling time,” *Physical Review Letters* **119**, p. 023201, 2017.
- [128] M. Li, H. Xie, W. Cao, S. Luo, J. Tan, Y. Feng, B. Du, W. Zhang, Y. Li, Q. Zhang, P. Lan, Y. Zhou, and P. Lu, „Photoelectron holographic interferometry to probe the longitudinal momentum offset at the tunnel exit,” *Physical Review Letters* **122**, p. 183202, 2019.
- [129] N. Teeny, E. Yakaboylu, H. Bauke, and C. Keitel, „Ionization time and exit momentum in strong-field tunnel ionization,” *Physical Review Letters* **116**, p. 063003, 2016.
- [130] H. Ni, U. Saalman, and J.-M. Rost, „Tunneling ionization time resolved by backpropagation,” *Physical Review Letters* **117**, p. 023002, 2016.
- [131] J. Tian, X. Wang, and J. H. Eberly, „Numerical detector theory for the longitudinal momentum distribution of the electron in strong field ionization,” *Physical Review Letters* **118**, p. 213201, 2017.
- [132] X. Wang, J. Tian, and J. H. Eberly, „Extended virtual detector theory for strong-field atomic ionization,” *Physical Review Letters* **110**, p. 243001, 2013.
- [133] X. Wang, J. Tian, and J. H. Eberly, „Virtual detector theory for strong-field atomic ionization,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **51**(8), p. 084002, 2018.
- [134] E. E. Serebryannikov and A. M. Zheltikov, „Strong-field photoionization as excited-state tunneling,” *Physical Review Letters* **116**, p. 123901, 2016.
- [135] M. Klaiber, K. Z. Hatsagortsyan, and C. H. Keitel, „Under-the-tunneling-barrier recollisions in strong-field ionization,” *Physical Review Letters* **120**, p. 013201, 2018.

-
- [136] D. D. Hickstein, P. Ranitovic, S. Witte, X.-M. Tong, Y. Huismans, P. Arpin, X. Zhou, K. E. Keister, C. W. Hogle, B. Zhang, C. Ding, P. Johnsson, N. Toshima, M. J. J. Vrakking, M. M. Murnane, and H. C. Kapteyn, „Direct visualization of laser-driven electron multiple scattering and tunneling distance in strong-field ionization,” *Physical Review Letters* **109**, p. 073004, 2012.