

Az erős teres ionizáció fejlett numerikus modellezése és kvantum tulajdonságai

Doktori értekezés tézisei

MAJOROSI SZILÁRD

Témavezető:

CZIRJÁK ATTILA

tudományos munkatárs, címzetes egyetemi docens
Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Fizikai Tanszék

Szegedi Tudományegyetem
Fizika Doktori Iskola
Természettudományi és Informatikai Kar
Elméleti Fizikai Tanszék

Szeged

2018

Bevezetés

Az elmúlt másfél évtizedben az attoszekundumos fényimpulzusokkal [1–6] elvégzett úttörő kísérletek forradalmasították az ezen az időskálán lezajló alapvető atomi, molekuláris és szilárdtestfizikai folyamatokkal kapcsolatos tudásunkat [7]. Ezen attoszekundumos fényimpulzusok előállításának alapja a nemesgázokban fellépő magasrendű felharmonikus keltés (HHG) [8, 9], aminek kulcslépései az atom alagutazásos ionizációja majd az így kiszabadult elektron visszatérése az iontörzshöz, amelyeket egy erős, lineárisan polarizált femtoszekundumos lézerrimpulzus elektromos mezője vezérel [10, 11]. A legújabb fejlemények az attoszekundumos fizikában rámutatnak, hogy az egy atom általi emisszió pontos leírása fontosabb mint valaha, különösen az attoszekundumos mérés technika által nyújtott kísérleti adatok helyes értelmezéséhez.

Habár létezik egy intuitív és nagyon sikeres közelítő analitikus megoldás [12] illetve ennek továbbfejlesztései [13], az egyatom válasz legpontosabb leírását a megfelelő időfüggő Schrödinger-egyenlet (TDSE) numerikus megoldása adja meg. A probléma egyik sajátossága a lézerrimpulzus elektromos terének erőssége, amelynek maximuma tipikusan 0.05-0.1 atomi egység tartományban van: ez lehetővé teszi az elektron alagutazását az erősen torzított atomi potenciál által alkotott időfüggő potenciálgáton keresztül, azonban ez a hatás gyenge az egész folyamat alatt. Másrésztől viszont, a hullámfüggvény ezen kis része a potenciálgáton kívül nagy távolságokra jut el, ezért ez adja a fő hozzájárulást a kibocsátott sugárzás forrásához, az időfüggő dipólus momentumhoz. Így egy nagyon gyenge hatást szükséges nagyon pontosan kiszámítani, és ezeket a követelményeket még fokozottabban kell figyelembe venni, ha a modell túlmegegy a szokásosan használt egy aktív elektron és dipól közelítéseken.

Lineárisan polarizált impulzusok esetén a fő dinamika az elektromos tér polarizációjának irányában történik, ez alapozza meg néhány egydimenziós (1D) közelítés sikerességét. Ezek a modellek tipikusan különféle 1D atomi modell potenciálok használatával próbálnak számot adni az atomi rendszer

viselkedéséről. Azonban a választott atomi modell potenciál nagyban befolyásolja az 1D eredményeket, és azok közvetlen összehasonlítása az igazi háromdimenziósakkal (3D) általában nem triviális. Ezért egy jobban meg-alapozott kapcsolat szükséges a 3D probléma és annak 1D modellje között annak érdekében, hogy az erős teres folyamatok 1D szimulációit fizikailag a leghelyesebben végezhessük el.

Habár az erős teres ionizáció egy széleskörűen használt standard eljárás a magasrendű felharmonikusok előállításához, az kevésbé ismert, hogy ez a folyamat a kiszabadított elektron és az ion-törzs között kvantumos összefonódottságot hoz létre. A kvantumos összefonódottság egy alapvető jellegzetessége a kvantumelméletnek, amely erős korrelációt képez a kvantumrendszer alkotói között és nincs klasszikus megfelelője. Dacára annak, hogy ennek fontosságát már a kvantum elmélet korai időszakában is felismerték [14], a folytonos változójú kvantumrendszerek összefonódottságnak tulajdonságai [15] jóval kevésbé felderítettek és felhasználtak, mint a diszkrét változójú rendszerek esetében. Fény hatására – pl. fotoionizáció vagy fotodisszociáció által – széteső atomi rendszer fragmentumai közötti összefonódottság is ilyen, amelyet Fedorov és munkatársai [16, 17] vizsgálták Gauss állapotok segítségével. Azonban ez a megközelítés nem megfelelő az elektron-iontörzs összefonódottság vizsgálatára erős teres ionizáció során, ami erős motivációt adott számunkra, hogy elvégezzük a probléma pontos numerikus vizsgálatát.

Célkitűzések

A már a Bevezetésben említett erős teres jelenségek tárgyalása során a fény által okozott hatásokat a szokásos szemiklasszikus módon írjuk le, amelyben felhasználjuk a dipól közelítést és ún. hossz-mértéket választunk [18]. Dipólközelítésben az elektromágneses mező térbeli változásait elhanyagoljuk az atomi folyamatok környezetében, amely igaz abban a frekvencia tartományban amely lényeges ezen doktori disszertációban tárgyalt folyamatok szempontjából. Célunk, hogy egy lineárisan polarizált, közeli infravörös vivőfrekvenciával rendelkező, egy- vagy néhány ciklusú lézerimpulzus által indukált

erős teres ionizációt vizsgáljunk. Egy ilyen lézerimpulzus rövid, de sokkal összetettebb választ generál mint egy egyszerű síkhullám. A megfelelő Hamilton operátor alakja alapján a 3D időfüggő Schrödinger-egyenletet a z és ρ hengerkoordinátákban célszerű felírni, ahol a z -tengely egybeesik a lézerimpulzus polarizációjának irányával. Az időfejlődés megőrzi az m mágneses kvantumszámot és a hullámfüggvény adott kezdeti forgásszimmetriáját.

Az első célkitűzésünk, hogy egy olyan új numerikus módszert alkossunk, amely képes az elektron hullámfüggvényének időfejlesztésére a hengerkoordinátákban felírt időfüggő Schrödinger-egyenlet nagy pontosságú megoldásával, figyelembe véve az atomi Coulomb potenciál szingularitásának hatását. Célunk továbbá, hogy a vázolt algoritmus számítási igénye lineárisan skálázódjon a térbeli rácpontok számával, és legyen párhuzamos szálakra bontható, amikor csak lehetséges.

Korábbi munkánkban [A1] egy egyelektronos atomot modelleztünk kéttest rendszerként egy dimenzióban a Dirac-delta potenciált mint atomi modell potenciált felhasználva. Erős korrelációt találtunk a lézerimpulzus időbeli alakja és az ebben a rendszerben lévő kvantumos összefonódottság oszcillációi között, az összefonódottság lokális maximumai egybeestek a lézerimpulzus elektromos terének zéróhelyeivel. Logikus kérdés, hogy ilyen korrelációk jelen vannak-e egy igazi atom erős teres ionizációja esetében is? Ennek megfelelően a második célkitűzésünk, hogy elvégezzük az egyelektronos atomok kvantumos összefonódottsági tulajdonságainak részletes vizsgálatát a Bevezetésben említett erős teres körülmények között. Ebben a leírásban az egyelektronos atomot elektron (e) és iontörzs (c) alrendszerekből álló kéttest problémaként modellezzük. Habár ezen probléma esetén a numerikus időfejlesztés elvégezhető, az elektron – iontörzs összefonódottság mértékének a számítási igénye olyan nagy, ami lehetetlenné teszi a kiszámítását értelmes idő alatt. Ezért azt tűztük ki célunkként, hogy adjunk egy közelítő megoldást erre a problémára, az irányok mentén szeparált közelítés által, és így betekintést nyerjünk a $z_e - z_c$ és $x_e - x_c$ elektron és iontörzs koordináták közötti párkorrelációk felépítésébe.

Harmadik célkitűzésünk, hogy találjunk egy olyan egydimenziós atomi

modell potenciált, ami képes kvantitatívan is jó egyezést nyújtani az igazi 3D erős teres folyamat z -tengelyre redukált megoldásával. Az egydimenziós leírás csak a z Descartes koordinátát tartalmazza, ugyanazzal a lézer elektromos tere által adott taggal az időfüggő Schrödinger-egyenletben mint 3D esetén, viszont a megfelelően választott új, időfüggetlen $V_{0,M}^{1D}(z)$ atomi modell potenciállal. Célunk volt levezetni egy analitikus potenciál formát tiszta fizikai elvekre alapozva, majd összehasonlítani ezt a már jól ismert modell potenciálokkal, pl.: az egydimenziós $V_{Sc}^{1D}(z) = -1/\sqrt{z^2 + 2}$ soft-core Coulomb modell potenciállal. Célunk, hogy az így kapott 1D-s modell potenciálok eredményeit szigorúan és részletekbe menően teszteljük, különösen az adott rendszer erős teres ionizációjának tulajdonságaira fókuszálva.

Módszerek

Az időfüggő Schrödinger-egyenlet numerikus megoldásához több módszer kombinációját használtuk fel. A tér szerinti deriváltak diszkrétizálására magasrendű véges differencia formulákat [19] használunk Δz , Δp egyenközű rácsbeosztásokkal hengerkoordinátákban. Az időfejlesztő algoritmust kis Δt lépésekben hajtjuk végre, felhasználva az evolúciós operátor $e^{-i\Delta t H_k}$ kis idő-intervallumra érvényes alakját, itt $H_k^{(2)}$ a k -dik lépés másodrendű effektív Hamilton operátora. Felhasználjuk továbbá a $e^{-i\Delta t H_k^{(2)}}$ exponenciális operátor másodrendű Padé-közelítését, amely a szokásos Crank-Nicolson módszert adja [20]. Ez utóbbi egy implicit módszer, amely azt jelenti, hogy minden időléptetés egy lineáris egyenletrendszer megoldásával jár, és ezen egyenletrendszer együththatómátrixa tartalmazza a térben diszkrétizált Hamilton mátrixot. Ennek a módszernek nagy előnye, hogy lehetővé teszi bármilyen peremfeltétel beépítését az implicit egyenletekbe, amely magasrendű térbeli pontosságot tesz lehetővé problémák széles köre esetében. A futtatások sebességének javítása érdekében felhasználjuk a split-operátor módszert [21]: azzal, hogy felbontjuk az effektív Hamilton operátort mint $H_k^{(2)} = H_A + H_B$, ez a módszer olyan szorzattá alakítja a fenti exponenciális operátort, amelynek tényezőit könnyű hattatni. A legismertebb ilyen formula a másodrendű szim-

metrikus felbontás $U_2(t + \Delta t, t) \approx e^{-i\frac{\Delta t}{2}H_B} e^{-i\Delta t H_A} e^{-i\frac{\Delta t}{2}H_B}$. A fő előnye, hogy ezzel a módszerrel elérhetjük azt, hogy a műveleti igény a térbeli rácpontok számával lineárisan skálázódjon (ha iránnyonként szétválasztjuk a Hamilton operátorban lévő kinetikus energia tagokat). A módszer hátránya az, hogy nem felbontható ilyen úton a Hamilton operátor, ha az szinguláris vagy „nagyon éles” egy adott rácpontban. Az igazán releváns split-operátor módszer Bandrauk és Shen [22] eredménye: az általuk adott formulák lehetővé teszik magasrendű Δt konvergencia elérését azáltal, hogy a megadott módon előre-hátra időléptetünk a megfelelően konstruált, másodrendben pontos kis időlépéses evolúciós operátorral.

A numerikus módszer formuláinak levezetése azonban általában nem elégséges ahhoz, hogy meghatározzuk a módszer valódi pontosságát, ezért szigorú tesztelés szükséges a legtöbb esetben. A tér szerinti deriváltak pontosságát tesztelő egyik módszerünkben kiszámoljuk ismert problémák alapállapotí és legalább egy gerjesztett állapotí sajátenergiáját numerikusan, és összehasonlítjuk azokat ismert analitikus vagy más nagyon pontos numerikus megoldásokkal. A Δz (vagy $\Delta \rho$) diszkretizációs paraméter változtatásával meg tudjuk határozni a térbeli diszkretizációs módszer konvergenciájának rendjét. Ez a megközelítés egyszerű olyan rendszerekre, amelyek rendelkeznek analitikus megoldással, például a kvantum harmonikus oszcillátor és a Coulomb probléma. Azonban analitikus megoldás nem ismert a legtöbb időfüggő probléma esetében, ekkor az eredményeket egy már konvergáltak tekinthető numerikus megoldással vetjük össze, amely utóbbinak numerikus hibái nagyságrendekkel kisebbek mint a beállítás amelyet vizsgálunk. Ennek legegyszerűbb útja az, hogy összehasonlítjuk a két megoldás időfüggő várható értékeit, amely a Δt függő hibák hatékony meghatározási módját jelenti, de a térbeli pontosságot is tesztelhetjük vele a Δz (vagy $\Delta \rho$) paraméter változtatásával.

Az elektron (e) és az iontörzs (c) alrendszerekből álló kölcsönható kéttest kvantumrendszer problémáját hagyományosan a tömegközépponti vonatkoztatási rendszerben oldjuk meg, ahol a hullámfüggvény szeparálható tömegközépponti és relatív koordináták szerint. A tömegközépponti részt egy szabad lokalizált Gauss hullámcsomagként írjuk le, és a relatív rész foglalja magá-

ban a z , ρ koordinátás relatív részecskének erős teres szimulációit. Az erős teres időfüggő Schrödinger-egyenlet alakja változatlan, de az elektron tömegét helyettesítjük a μ redukált tömeggel. Fizikai mennyiségek számolása során továbbá felhasználjuk az állapot kezdeti forgásszimmetriáját a z -tengely körül, ami azt jelenti, hogy x és y irányokban a dinamika azonos lesz.

A szokásos módszer az iontörzs és elektron közötti kvantumos összefonódottság mennyiségi jellemzésére az elektron vagy az iontörzs koordinátás egyrészecske sűrűségmátrix kiszámítását foglalja magában, amelyet a többi szabadsági fokra vett parciális átlósösszeg (vagyis ezen koordináták szerinti integrálás) után kapunk meg, feltéve, hogy a teljes kvantumrendszer tiszta állapotban van. Ekkor ezen részrendszerek sűrűségmátrixainak kevertisége egyértelmű jellemzője az összefonódottságnak, amelyet kvantitatíve a Neumann entrópiával – általánosabban valamilyen kvantum entrópiával – írunk le, ezt az egyik alrendszer sűrűségmátrixából számítjuk ki. Ha minden egyes időpontban végre tudjuk ezt hajtani, megkapjuk a két részecske összefonódottságának időfüggő dinamikáját, ez azonban sajnos csak egydimenziós modell esetén keresztülvihető számítás. Három dimenzióban ez a típusú kétrészű megközelítés gyakorlatilag csak a z , ρ koordinátákra kiszámítható, amely érdekes információkat adhat az erős teres folyamatok irányonkénti nem-szeparálhatóságáról. A kompozit rendszer azonban hat szabadsági fokkal rendelkezik három dimenzióban, amely egy sokkal bonyolultabb korrelációs struktúrát von maga után a $z_e - z_c$ és $x_e - x_c$ koordináták között. Ezen korrelációk természetét a kvantum-információelmélet újabb eredményei segítségével [23] vizsgáltuk meg. Ezen irány menti párkorrelációkat mennyiségileg az úgynevezett $S(e : c, t)$ kvantum kölcsönös entrópiával jellemezhetjük, és ezek viselkedését a $S(e|c, t)$ vagy $S(c|e, t)$ kvantum feltételes entrópiákkal tárhatjuk fel, utóbbi az egyik részrendszer megmaradt entrópiáját jellemzi, amennyiben a másikon teljes mérést hajtottunk végre. Klasszikus határesetben ez a két entrópia a klasszikus információelmélet összefüggéseit teljesíti, azonban a kvantumos összefonódottság nemklasszikus számértékeket tesz lehetővé számukra.

Atomok alacsony dimenziós modellezéséhez a sűrűségfunktional elmé-

let [24] elemeit használtuk fel. A modell potenciálunkat az egyetlen pályával leírt hélium atom egzakt Kohn-Sham potenciáljának analógiája alapján vezetjük le: ismerve a helyes redukált (egyrészecske) sűrűséget, invertálhatjuk a Schrödinger-egyenletet, ami meghatározza ezt potenciált. Ez az előállítás biztosítja, hogy az így kapott Hamilton operátor alapállapota a helyes redukált sűrűséggel rendelkezzen. Ily módon fizikailag modellezni tudjuk a rendszer alapállapotát amennyire helyesen csak lehet egyetlen hullámfüggvény vagy pálya segítségével.

Tudományos eredmények

Az alábbiakban röviden ismertetem a disszertációban bemutatott új tudományos eredményeimet öt tézispontban összefoglalva. A megállapításaimhoz kapcsolódó, a füzet végén található listában összegyűjtött publikációkra a tézispontok címében hivatkozom.

T1. Hibrid split-operátor algoritmus a Coulomb szingularitásokat tartalmazó háromdimenziós időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldásához [P1]

Abból a célból, hogy kezeljem a Coulomb szingularitásokat a háromdimenziós hengerkoordinátás Schrödinger-egyenletben, levezettem a Coulomb potenciál peremfeltételére vonatkozó formulát forgásszimmetrikus esetben, a $\rho = 0$ tengely mentén. Megadtam ennek a peremfeltételnek a diskretizált formáját féloldali véges differencia formulákat használva.

A Hamilton operátor negyedrendű véges differencia közelítése alapján felírtam a hibrid splitting módszerét. Ez a split-operátor módszer a kis időintervallumú evolúciós operátor részleges irány menti felbontásán alapul. Ez azt jelenti, hogy a $H_k^{(2)} = H_A + H_B$ operátor mind térbeli irányok és térbeli tartományok szerinti felbontást is magában foglal: a H_A operátor a $\rho = 0$ tengelyhez közel megegyezik $H_k^{(2)}$ -vel azért, hogy ezen perem környékén a

módszer megőrizzze a numerikus pontosságot, és mindeközben a külső tartományban ($\rho \gtrsim 1$) a kinetikus energia z -komponense átkerül a H_B operátorba.

Létrehoztam egy optimalizált algoritmust ami megoldja az $e^{-i\Delta t H_A}$ központi exponenciális operátor Crank-Nicolson közelítése eredményeképpen előálló speciális blokk pentadiagonális lineáris egyenletrendszer. Ez az algoritmus a számítási igényt N_ρ^2 -el csökkenti, ahol N_ρ a ρ tengely mentén lévő a rácspontok száma.

Szimulációkkal igazoltam, hogy a fenti diszkretizációs séma Δz és $\Delta \rho$ térlépésekben negyedrendben pontos a hidrogén atom és a kvantum harmonikus oszcillátor sajátenergiáinak kiszámolásával. Felhasználva a kényszerített kvantum harmonikus oszcillátor időfüggő analitikus megoldását igazoltam továbbá, hogy a hibrid splitting módszer Δt^2 pontos, és sikeresen kombinálható az evolúciós operátor negyedrendű közelítéseivel, hogy időlépésben Δt^4 pontosságot nyújtson.

T2. Az elektron – iontörzs kvantumos összefonódottságának kvantitatív jellemzése erős teres ionizáció során [P2]

Megmutattam, hogy az iontörzs – elektron rendszer háromdimenziós erős teres szimulációiban a megfelelő Neumann entrópia numerikus kiszámítása nem keresztülvihető a probléma rendkívül magas számítási igénye miatt. Ezért megalkottam a következő eljárást a iontörzs és az elektron kvantumos összefonódottságának jellemzésére erős teres folyamatokban.

Először redukáltam a 3D-s dinamikát a lézerimpulzus polarizációjára párhuzamos és merőleges térbeli irányokra úgy, hogy parciális átlósösszegét vettem a megfelelő sűrűségmátrixoknak. Ezután elvégeztem minden irányban az áttérést elektron és iontörzs koordinátákra és tovább redukáltam ezeket a sűrűségmátrixokat a megfelelő részecskére vett parciális átlósösszeg végrehajtásával. A kvantumentrópiák ismert összefüggéseit felhasználva megmutattam, hogy a két részecske azonos irányú koordinátái közötti korreláció dominánsan kvantumos összefonódottság. Ennek az irány menti kvantumos összefonódottságnak a mértékét az átlagos irány menti kölcsönös entrópiával

jellemeztem. Megmutattam, hogy az átlagos kölcsönös entrópia időfejlődése a lézerimpulzus polarizációs irányában nagyon hasonló a korábbi egydimenziós számolásaim során kapott egzakt kvantumos összefonódottsági entrópiák időfejlődéséhez.

Ezeket a sűrűségmátrixokat felhasználva, a 3D-s iontörzs – elektron rendszer kvantumállapotát az irányokra redukált kétrészecske sűrűségmátrixok szorzatával közelítettem, arra a szimulációs tapasztalatomra alapozva, hogy az erős teres dinamika a fenti irányok mentén csak gyengén csatolt.

Ezek alapján definiáltam a 3D-s iontörzs – elektron rendszer közelítő összefonódottsági entrópiáját mint az átlagos irány menti kölcsönös entrópiák összegét, amely hatékonyan számolható a már meghatározott irány menti sűrűségmátrixok segítségével. Megmutattam szimulációk segítségével, hogy ez a közelítő összefonódottsági entrópia kielégíti az erős szubadditivitás tételét, amely az egzakt összefonódottsági entrópia fontos analitikus tulajdonsága.

T3. Az elektron – iontörzs kvantumos összefonódottság tulajdonságai erős teres ionizáció során [P2]

Mivel a **T2** pontban bevezetett térben redukált alrendszerek kevert állapotban vannak, ezért a korrelációs tulajdonságaik sokkal bonyolultabbak, mint tiszta állapoti összefonódottság esetén, ebből adódóan először azonosítottam a fenti eljárással kapcsolatos különféle entrópiák fizikai jelentését. Ezek alapján a következő megállapításokat tettem.

Részletesen elemeztem a összefonódottsági entrópiák összefüggéseit minden egyes irányban a **T2** tézispont szerint, és azt találtam, hogy a lokális maximumaik szinte egybeesnek a lézerimpulzus elektromos terének zéróhelyével. A lézerimpulzus polarizációjával párhuzamos és merőleges irányokban az összefonódottság nagyon hasonló egymáshoz, amennyiben a lézertér erőssége az alagutazásos ionizációnak megfelelő tartományban van. Azonban potenciálgát feletti ionizáció esetén a polarizációval párhuzamos irányban az összefonódottsági entrópia növekedést, míg a merőleges irányokban ezen entrópia csökkenést mutat, amelyek összhatása csökkenést eredményez a teljes

iontörzs – elektron összefonódási entrópiánál.

Megvizsgáltam a fenti javasolt összefonódási dinamika mértékeinek függetlenségét a vezérlő lézermimpulzus erősségétől és vivő-burkoló fázisától. A kvantumentrópiák időfejlődésében több olyan tulajdonságot is találtam, amelyek nem függenek ezektől a paramétereiktől, például az iontörzs – elektron összefonódottság mindig maximumot ér el a lézermimpulzus zéróhelyei körül. Azt is megfigyeltem, hogy miközben a külső tér intenzitása az erős teres ionizáció dinamikájának egészét irányítja, addig a vivő-burkoló fázis csak a ciklusokon belüli dinamikát változtatja meg.

T4. Egydimenziós sűrűség alapú atomi modell potenciálok: 1D és 3D eredmények összehasonlítása [P3]

Levezettem annak az egydimenziós atomi modell potenciálnak az analitikus formuláját, amely definíció szerint ugyanazzal az alapállapotú valószínűségi sűrűséggel rendelkezik, mint a háromdimenziós Coulomb probléma ρ változó szerint integrált valószínűségi sűrűsége. Megállapítottam, hogy az aszimptotikus viselkedése által ez az 1D modell megőrzi a 3D probléma alapállapotú energiáját, amennyiben a 3D problémához tartozó potenciál aszimptotikusan Coulomb alakú. Ez az új sűrűség alapú 1D atomi modell potenciál egy regularizált 1D Coulomb potenciálból és egy kinetikus energia korrekcióból áll.

Felismertem, hogy a sűrűség alapú 1D atomi modell potenciál regularizált Coulomb része $\frac{1}{2}Z$ effektív magtöltést tartalmaz egyelektronos atomokra (ahol Z az eredeti magtöltés). Ez alapján tökéletesítettem az 1D soft-core Coulomb és a regularizált 1D Coulomb potenciálra vonatkozó formulákat úgy, hogy $\frac{1}{2}Z$ effektív magtöltéssel rendelkezzenek és az alapállapotú energiájuk maradjon egyenlő a 3D Coulomb problémáéval.

Lineárisan polarizált közeli infravörös lézermimpulzus által vezérelt időfüggő erős teres szimulációk eredményeinek összehasonlításával megmutattam, hogy az új és a tökéletesített modell potenciálok az erős teres folyamatok alacsony frekvenciás válaszainak tekintetében sokkal pontosabb eredménye-

ket adnak, mert kvantitatíve helyesen modellezik az igazi 3D dinamika lényegi elemeit. Ezek a tesztek azt is megmutatták, hogy ezen potenciálok közül a tökéletesített soft-core Coulomb potenciál adja a legpontosabb közelítést.

Az esetek széles körében kiszámoltam a dipól teljesítményspektrumot és arra a következtetésre jutottam, hogy az 1D sűrűség alapú és a tökéletesített modell potenciálok által nyújtott spektrumok szerkezete nagyon hasonló a 3D szimulációkból kapottakhoz. A megfelelő spektrális fázisok egyezése is nagyon jó, különösen a magas frekvenciás tartományban, amely alapvető fontosságú az izolált attoszekundumos lézerimpulzusok előállításának szempontjából. Megadtam egy egyszerű frekvenciafüggő skálafüggvényt, amely képesnek bizonyult a kapott 1D spektrumokat a megfelelő 3D spektrumokká átalakítani a tesztelt esetekben, ami a valódi dipól teljesítményspektrum 1D szimulációkon alapuló mennyiségileg helyes számítását is lehetővé teszi.

T5. Javított numerikus módszer diszkrét modell potenciálok előállítására egy dimenzióban: nagyobb szimulációs pontosság [P3]

Javasoltam egy formulát, amely 1D modell potenciálok jelentősen pontosabb diszkrétizált reprezentációját adja meg, a potenciál egzakt alapállapotán és alapállapot energiáján alapulva, a megfelelő diszkrétizált időfüggetlen Schrödinger-egyenlet inverziójának segítségével. Az így kapott diszkrétizált potenciálok numerikusan egzakt alapállapottal és energiával rendelkeznek. Megmutattam, hogy ha az egzakt 1D potenciál nem differenciálható egy térbeli rácspontban (pl. az 1D regularizált Coulomb potenciál), akkor az így előállított diszkrét Hamilton mátrix Δz^4 pontosságú, amennyiben a benne lévő parciális deriváltak is legalább Δz^4 pontossággal rendelkeznek, ami az erős teres szimulációk során is igaznak bizonyult.

Megmutattam, hogy a fenti módszer alkalmazható az 1D Dirac-delta potenciálra is. A fent említett inverziós formula ennek a modell potenciálnak egy nemszinguláris diszkrétizált reprezentációját adja. Azt kaptam erős teres szimulációkon alapuló konvergencia teszteket elvégezve, hogy a módszer

numerikus hibái $\Delta z = 0.2$ -nél hasonlóak az [A1] cikkünkben használt korrekt módszeréhez. Arra a következtetésre jutottam, hogy ez a nemsinguláris diszkretizált módszer az igazi megoldáshoz konvergál és Δz^2 numerikus pontosságot mutat.

Publikációk

A tézispontokhoz kötődő referált folyóiratcikkek:

- [P1] Szilárd Majorosi and Attila Czirják. Fourth order real space solver for the time-dependent Schrödinger equation with singular Coulomb potential. *Computer Physics Communications*, 208: 9–28, 2016; doi:10.1016/j.cpc.2016.07.006.
- [P2] Szilárd Majorosi, Mihály G. Benedict, and Attila Czirják. Quantum entanglement in strong-field ionization. *Physical Review A*, 96(4): 043412, 2017; doi: 10.1103/PhysRevA.96.043412.
- [P3] Szilárd Majorosi, Mihály G. Benedict, and Attila Czirják. Improved one-dimensional model potentials for strong-field simulations. *Physical Review A*, 98(2): 023401, 2018; doi: 10.1103/PhysRevA.98.023401.

További referált folyóiratcikkek és konferencia közlemények:

- [A1] Attila Czirják, Szilárd Majorosi, Judit Kovács, and Mihály G. Benedict. Emergence of oscillations in quantum entanglement during rescattering. *Physica Scripta*, 2013(T153): 014013, 2013. doi:10.1088/0031-8949/2013/T153/014013.
- [A2] Attila Czirják, Szilárd Majorosi, Judit Kovács, and Mihály G. Benedict. Build-up of quantum entanglement during rescattering. *In AIP Conference Proceedings*, 1462(1): 88-91. AIP, 2012; doi: 10.1063/1.4736766.

Hivatkozások

- [1] M Hentschel, R Kienberger, Ch Spielmann, Georg A Reider, N Milosevic, Thomas Brabec, Paul Corkum, Ulrich Heinzmann, Markus Drescher, and Ferenc Krausz. Attosecond metrology. *Nature*, 414(6863): 509–513, 2001.
- [2] PM Paul, ES Toma, P Breger, Genevive Mullot, F Augé, Ph Balcou, HG Muller, and P Agostini. Observation of a train of attosecond pulses from high harmonic generation. *Science*, 292(5522):1689–1692, 2001.
- [3] Reinhard Kienberger, Michael Hentschel, Matthias Uiberacker, Ch Spielmann, Markus Kitzler, Armin Scrinzi, M Wieland, Th Westerwalbesloh, U Kleineberg, Ulrich Heinzmann, et al. Steering attosecond electron wave packets with light. *Science*, 297(5584):1144–1148, 2002.
- [4] Markus Drescher, Michael Hentschel, R Kienberger, Matthias Uiberacker, Vladislav Yakovlev, Armin Scrinzi, Th Westerwalbesloh, U Kleineberg, Ulrich Heinzmann, and Ferenc Krausz. Time-resolved atomic inner-shell spectroscopy. *Nature*, 419(6909):803–807, 2002.
- [5] Andrius Baltuška, Th Udem, M Uiberacker, M Hentschel, E Goulielmakis, Ch Gohle, Ronald Holzwarth, VS Yakovlev, A Scrinzi, TW Hänsch, et al. Attosecond control of electronic processes by intense light fields. *Nature*, 421(6923):611–615, 2003.
- [6] Ferenc Krausz and Misha Ivanov. Attosecond physics. *Reviews of Modern Physics*, 81(1):163–234, 2009.
- [7] Matthias Uiberacker, Th Uphues, Martin Schultze, Aart Johannes Verhoef, Vladislav Yakovlev, Matthias F Kling, Jens Rauschenberger, Nicolai M Kabachnik, Hartmut Schröder, Matthias Lezius, et al. Attosecond real-time observation of electron tunnelling in atoms. *Nature*, 446 (7136):627–632, 2007.

- [8] A McPherson, G Gibson, H Jara, U Johann, Ting S Luk, IA McIntyre, Keith Boyer, and Charles K Rhodes. Studies of multiphoton production of vacuum-ultraviolet radiation in the rare gases. *Journal of the Optical Society of America B*, 4(4):595–601, 1987.
- [9] Gy Farkas and Cs Tóth. Proposal for attosecond light pulse generation using laser induced multiple-harmonic conversion processes in rare gases. *Physics Letters A*, 168(5):447–450, 1992.
- [10] LV Keldysh. Ionization in the field of a strong electromagnetic wave. *Soviet Physics JETP*, 20(5):1307–1314, 1965.
- [11] Paul B Corkum. Plasma perspective on strong field multiphoton ionization. *Physical Review Letters*, 71(13):1994, 1993.
- [12] Maciej Lewenstein, Ph Balcou, M Yu Ivanov, Anne L’huillier, and Paul B Corkum. Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields. *Physical Review A*, 49(3):2117, 1994.
- [13] Misha Yu Ivanov, Michael Spanner, and Olga Smirnova. Anatomy of strong field ionization. *Journal of Modern Optics*, 52(2-3):165–184, 2005.
- [14] Albert Einstein, Boris Podolsky, and Nathan Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Physical Review*, 47(10):777, 1935.
- [15] Samuel L Braunstein and Peter Van Loock. Quantum information with continuous variables. *Reviews of Modern Physics*, 77(2):513, 2005.
- [16] MV Fedorov, MA Efremov, AE Kazakov, KW Chan, CK Law, and JH Eberly. Packet narrowing and quantum entanglement in photoionization and photodissociation. *Physical Review A*, 69(5):052117, 2004.
- [17] MV Fedorov, MA Efremov, PA Volkov, and JH Eberly. Short-pulse or strong-field breakup processes: a route to study entangled wave packets.

Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 39(13): S467, 2006.

- [18] Brian Harold Bransden and Charles Jean Joachain. *Physics of Atoms and Molecules*. Pearson Education India, 2003.
- [19] W van Dijk and FM Toyama. Accurate numerical solutions of the time-dependent Schrödinger equation. *Physical Review E*, 75(3):36707, 2007.
- [20] IV Puzynin, AV Selin, and SI Vinitzky. A high-order accuracy method for numerical solving of the time-dependent Schrödinger equation. *Computer Physics Communications*, 123(1):1–6, 1999.
- [21] Andre D Bandrauk and Huizhong Lu. Exponential propagators (integrators) for the time-dependent Schrödinger equation. *Journal of Theoretical and Computational Chemistry*, 12(06):1340001, 2013.
- [22] André D Bandrauk and Hai Shen. Higher order exponential split operator method for solving time-dependent Schrödinger equations. *Canadian Journal of Chemistry*, 70(2):555–559, 1992.
- [23] Nicolas J Cerf and Chris Adami. Negative entropy and information in quantum mechanics. *Physical Review Letters*, 79(26):5194, 1997.
- [24] Walter Kohn and Lu Jeu Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140(4A):A1133, 1965.