

EGY-CIKLUSÚ, KÖZELI INFRAVÖRÖS LÉZERIMPULZUSSAL VEZÉRELT ALAGUTAZÁSOS IONIZÁCIÓ FÁZISTERES VIZSGÁLATA

Hack Szabolcs¹, Majorosi Szilárd², Benedict Mihály², Varró Sándor^{1,3} és Czirják Attila^{1,2}

¹ELI-ALPS, Szeged, Magyarország

²Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Fizikai Tanszék, Szeged, Magyarország

³Wigner Fizikai Kutatóközpont, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet, Budapest, Magyarország

DOI: <https://doi.org/10.14232/kvantumelektronika.9.13>

1. Bevezetés

Az atomok erős lézertérben történő ionizációja alapvető szerepet játszik az attoszekundumos fizikában [1]: egy elegendően nagy intenzitású lézerimpulzus hatására az elektron atomi kötött állapotából (általában alagutazással) a kontinuumba távozik. Ez a rendkívül sikeres „három-lépéses modell” első lépése, amely a magas rendű harmonikus keltés és számos attoszekundumos mérés és eljárás elméleti alapja. Jelenleg az alagutazási idő [2] és az alagútból való kilépést jellemző impulzus az alagutazásos ionizáció alapvető fontosságú problémái, mind a kvantumelmélet, mind az attoszekundumos fizikában jellemző kísérleti eredmények értelmezése szempontjából. Az elmúlt években több csoport publikált releváns kísérleti eredményeket [3-7], általában az „attoclock” módszerrel. Bár ezeknek a méréseknek az értelmezése általában nehéz, és vannak ellentmondások is, a cirkulárisan polarizált lézerimpulzussal atomi hidrogén esetén kapott legújabb mérési eredmények [7] megegyezni látszanak a korábbi elméleti eredménnyel [8,9], miszerint nincs késés a lézerimpulzus csúcsa és az elektronnak az alagút kijáratánál történő megjelenése között.

Kevésbé felderítettek az alagutazásos ionizáció ilyen részletei lineárisan polarizált lézerimpulzus esetén, annak ellenére, hogy ez a legelterjedtebb módszer izolált attoszekundumos impulzusok előállítására: ha a lézerimpulzus elektromos térerőssége csak a fő csúcsot tartalmazó félciklus alatt halad meg egy bizonyos küszöbértéket [10], akkor az alagutazásos ionizáció gyakorlatilag csak ebben a félciklusban lehetséges.

Jelen közleményünkben egyetlen atomnak egy lineárisan polarizált lézerimpulzus hatására történő alagutazásos ionizációját elemezzük a klasszikus fázistéren a Wigner-függvény segítségével. Így a korábbiaknál jobb klasszikus elektronpályákat kaphatunk, amelyek a kvantum-momentum függvényen alapuló kezdő impulzussal indulnak, és nagyon jól egyeznek a későbbi kvantumos időfejlődéssel is. Atomi egységeket használunk.

2. Elméleti modell és numerikus szimulációk

Egy egyszerűsített elméleti modell keretein belül dolgozunk: dipól-közelítést használunk az egyetlen aktív elektronnal rendelkező atom és a klasszikus elektromágneses mező kölcsönhatásának leírására, ún. hossz-mértékben. A közeli infravörös lézerimpulzus elektromos terét szinusz-négyzet burkolóval modellezzük, a lineáris polarizáció iránya a z-tengely:

$$E_z(t) = F \cdot \sin^2\left(\frac{\pi t}{NT}\right) \cos\left(\frac{2\pi t}{T} + \phi\right),$$

itt F a térerősség csúcserőssége, N az impulzus T periódusidejű optikai ciklusainak száma, ϕ pedig a vivő-burkoló fáziskülönbség (CEP). Jelen munkánkban $F = 0.06$, $N = 3$, $T = 110$ (ami kb. 800 nm központi hullámhossznak felel meg) és $\phi = 0$. Ezekkel a paraméterekkel a lézerimpulzus időbeli hossza (intenzitás félértékességben) a periódusidő közelében van, azaz közel egy-ciklusú.

Ez a lézerimpulzus gerjeszti a hidrogénatomot, amely kezdetben alapállapotban van. Az elektron hullámfüggvénye mindvégig független marad a z-tengely körüli azimutális szögtől, ezért a háromdimenziós (3D) időfüggő Schrödinger-egyenletet célszerűen henger-koordinátarendszerben írjuk fel, rögzített atommagot feltételezve:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(z, \rho, t) = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\sqrt{z^2 + \rho^2}} + E_z(t)z \right] \Psi(z, \rho, t)$$

A közelmúltban kifejlesztett algoritmusunk [11] térben és időben negyedrendben pontosan oldja meg numerikusan a fenti egyenletet, a Coulomb-szingularitást peremfeltétellel figyelembe véve. A lézerimpulzus csúcsértékét úgy állítottuk be, hogy a Keldysh-paraméter mindvégig 1 alatt maradjon és a csúcs közelében közel 1 legyen, így az alagutazásos ionizáció a teljes impulzus alatt lehetséges legyen, ugyanis ez a releváns a gáz-HHG jelenleg használatos kísérleti technikai szempontjából.

Mivel a lényeges kvantum dinamika a lézer polarizációs irányában történik, és a fázisteres elemzés 1-dimenzióban (1D) a legkönnyebben áttekinthető, kiszámítjuk az (általában kevert) 1D-re redukált kvantumállapot sűrűségmátrixát a z-tengely mentén a 3D numerikus megoldásból

$$\varrho(z, z', t) = 2\pi \int_0^\infty \Psi^*(z, \rho, t) \Psi(z', \rho, t) \rho d\rho$$

amiből az alábbi definíció szerint számítjuk ki a Wigner-függvényt:

$$W(z, p_z, t) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \varrho(z + \zeta, z - \zeta, t) \exp(2ip_z \zeta) d\zeta$$

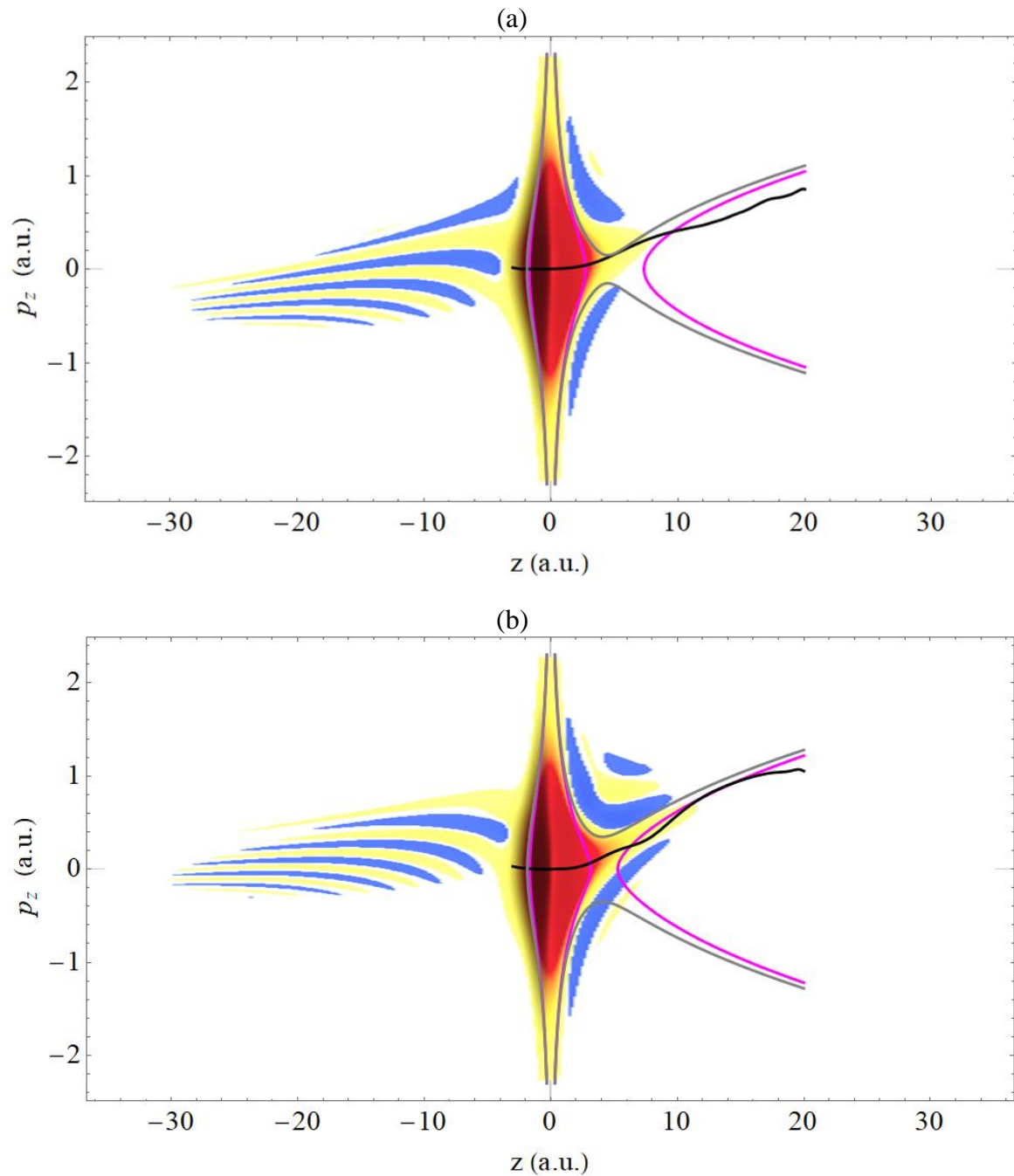
A Wigner-függvényt, negatív értékei és nem-klasszikus mozgásegyenlete miatt, általánosan nem lehet klasszikus fázistér-eloszlásként értelmezni. Azonban a Wigner-függvény alábbi

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

momentumai alapján kiszámolhatunk egy helytől függő átlagos impulzus az alábbi definícióval:

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

amelyet általában kvantum-momentum függvénynek szokás nevezni. Ez a fizikai mennyiség, hasonlóan a valószínűségi áramsűrűséghez, nem additív: két kvantumállapot szuperpozíciója esetén az eredő kvantum-momentum függvényben általában interferencia-tagok is fellépnek.



I. ábra

Két pillanatkép a lézerimpulzus hatására a hidrogénatomból kilépő elektron Wigner-függvényéről: (a) 10 atomi időegységgel a lézerimpulzus csúcsa előtt és (b) a lézerimpulzus csúcspontjánál. A Wigner-függvényt a kék-fehér-sárga-vörös színskálával ábráztuk: a kék negatív, a fehér lényegében zéró, majd a sárgától a vörösig növekvő pozitív függvényértéket jelent. A kvantum-momentum függvény a fekete görbe mutatja. A lila görbe egy olyan részecske fázistér-trajektóriája az atommag és a lézertér pillanatnyi eredő potenciáljában, amelynek energiája megegyezik az elektron energiájának pillanatnyi várható értékével. Ugyanebben a potenciálban a szürke görbén mozogva egy olyan részecske, aminek energiája az elektron energia pillanatnyi várható értékének és szórásának összege.

3. Eredmények

Az 1. ábra alapján mutatjuk be, hogyan segíti a Wigner-függvény és a kvantum-momentum függvény a lézerimpulzus hatására bekövetkező ionizációt elemzését. A $z = 0 - 10$ a.u. tartományban a Wigner-függvényben kialakuló, ionizációs folyamatot jelző hullámok ill. „nyúlványok” fő vonulatát jól követi a kvantum-momentum függvény, hasonlóan egy korábbi munkánkhoz [12], az alatta és felette kialakuló oszcillációk pedig kvantum-interferenciát jeleznek. A berajzolt állandó energiájú fázistér-trajektóriák közül a lila színű egyben az alagút tartomány pillanatnyi határát is megadja, a sötét pedig egy olyan mozgáshoz tartozik, amelyik energiája már elég nagy ahhoz, hogy a pillanatnyi potenciálgáton átjutva vezessen ionizációhoz. Utóbbi alakja jól követi a Wigner-függvény kontúrját az alagút tartományában is.

Az energiaviszonyok gondos numerikus elemzése rávilágít arra, hogy lézerimpulzus hatására az elektron energiájának szórása elég nagy lesz ahhoz, hogy a potenciálgát felett átjutva is megnyílik az ionizáció lehetősége, annak ellenére, hogy az energia várható értéke valójában (kis mértékben) csökken a kezdeti állapothoz képest, miközben a lézerimpulzus a fő csúcsához közeledik (összhangban a Stark-effektussal). Tehát, bár látszólag mindvégig az alagutazásos ionizáció tartományban maradnak a paraméterek, valójában a potenciálgát felett ionizációs csatorna is megnyílik. Az alagútnak megfelelő illetve azzal kívülről szomszédos fázistér-tartományban a Wigner-függvény hullámvonulatai és oszcillációi valójában az alagúteffektussal illetve a potenciálgát felett átjutó komponensek kvantum-interferenciáját mutatják. Az alagúteffektussal átjutó komponens alagút tartományon kívüli kezdeti kvantum-momentum függvénye lényegében (a numerikus módszer pontosságával) zéró, ahogy azt az alagutazás energiaviszonyai alapján várnánk is (az alagút tartomány kijárata az a hely, ahol a kinetikus energia 0). Ez azonban nem jelenti azt, hogy az alagutazással kijutó komponens ne befolyásolná az eredő kvantum-momentum függvényt: utóbbi tartalmazza az előbbiből származó interferencia tagokat is.

A kvantum-momentum függvénynek az alagút kijáratában felvett értékét kézenfekvő egy klasszikus részecske-propagáció kezdeti impulzus értékének választani, de ettől kissé eltérő megfontolások is kvalitatívan hasonló fázistér-trajektóriákat eredményeznek. Ezek vizsgálata során szintén jól használható a kvantum-momentum függvény: ha a részecske aktuális helyzete a fázistérben jól követi a kvantum-momentum függvény időbeli viselkedését, akkor a klasszikus trajektória jó összhangban van a kvantumos időfejlődéssel.

Köszönetnyilvánítás

A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg, **EFOP-3.6.2-16-2017-00005-Ultragyors fizikai folyamatok atomokban, molekulákban, nanoszerkezetekben és biológiai rendszerekben**. Az ELI-ALPS projektet (GINOP-2.3.6-15-2015-00001) az Európai Unió és az Európai Regionális Fejlesztési Alap támogatja. Munkánkat a TUDFO/47138-1/2019-ITM FIKP és a GINOP-2.3.2-15-2016-00036 számú pályázatok is támogatták.

Irodalom

[1] F. Krausz and M. Ivanov, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 163–234 (2009).

<https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.163>

[2] A. S. Landsman and U. Keller, *Physics Reports* **547**, 1 – 24 (2015).

<https://doi.org/10.1016/j.physrep.2014.09.002>

- [3] P. Eckle, et al., *Science* **322**, 1525–1529 (2008).
<https://doi.org/10.1126/science.1163439>
- [4] D. Shafr, et al., *Nature* **485**, 343 (2012).
<https://doi.org/10.1038/nature11025>
- [5] A. S. Landsman and U. Keller, *J. Phys. B* **47**, 204024 (2014).
<https://doi.org/10.1088/0953-4075/47/20/204024>
- [6] N. Camus, et al., *Phys. Rev. Lett.* **119**, 023201 (2017).
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.023201>
- [7] U. S. Sainadh, et al., *Nature* **568**, 75–77 (2019).
<https://doi.org/10.1038/s41586-019-1028-3>
- [8] L. Torlina and O. Smirnova *Phys. Rev. A* **86**, 043408 (2012).
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.86.043408>
- [9] H. Ni, et al., *Phys. Rev. A* **97**, 013426 (2018).
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.97.013426>
- [10] M. Lewenstein, et al., *Phys. Rev. A* **49**, 2117 (1994).
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.49.2117>
- [11] Sz. Majorosi and A. Czirják, *Computer Physics Communications* **208**, 9–28 (2016).
<https://doi.org/10.1016/j.cpc.2016.07.006>
- [12] A. Czirják, et al., *Opt. Commun.* **179**, 29–38 (2000).
[https://doi.org/10.1016/S0030-4018\(99\)00591-X](https://doi.org/10.1016/S0030-4018(99)00591-X)