

21.

KELTETT ÁRAMON ALAPULÓ LÉZER–ANYAG KÖLCSÖNHATÁS KARAKTERIZÁLÁSA RÉTEGELT SZILÁRDTEST MODELLBEN

Magashegyi István, Földi Péter^{1,4}

¹*Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Intézet, Elméleti Fizikai Tanszék, Szeged*

²*HUN-REN-SZTE Fotoakusztikus Környezetifolyamat-megfigyelési Kutatócsoport, Szeged*

³*HUN-REN Wigner Fizikai Kutatóközpont, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet, Budapest*

⁴*ELI ALPS Lézeres Kutatóintézet, Szeged*

Az ultrarövid, femto- és attoszekundumos tartományba eső lézerimpulzusok nemcsak a fizikai alap kutatásban, hanem biológiai, orvosi és ipari alkalmazásokban is forradalmi áttörést jelentenek. Az ilyen impulzusok alkalmazása olyan új lehetőségeket teremt, amelyek túlmutatnak a hagyományos spektroszkópiai technikák időfelbontásán. A különböző időbeli dinamikák megértéséhez olyan detektálási módszerekre van szükség, amelyek időfelbontása meghaladja a vizsgált jelenségek karakterisztikus időskáláit [1, 2]. A fényimpulzusok terjedését és különböző anyagokkal való kölcsönhatását jelentősen befolyásolja az úgynevezett vivő-burkoló fázis (Carrier-envelope phase, CEP), ami lényegében a maximális térerősség időbeli eltolódását jelenti az impulzus burkolójának maximumához képest [3, 4, 5, 6, 7].

A CEP ismeretének jelentősége különösen megnő, amikor a cél nem csupán az impulzus energiatartalmának becslése, hanem annak pontos időbeli szerkezete is lényeges [8]. A vivő-burkoló fázis (CEP) szerepe ebben a kontextusban különösen fontos: a fényimpulzus időbeli szerkezetét alapvetően meghatározó paraméterről van szó, amely érzékenyen befolyásolja az anyaggal való kölcsönhatás során keltett töltésáramot is [3, 8, 9]. Mivel a CEP meghatározása közvetlenül nem egyszerű, olyan közvetett módszerek iránt mutatkozik igény, amelyek során például a szilárdtestben keletkező töltésből következtethetünk a fényimpulzus fázisára [10, 11].

A kutatás során egy egydimenziós szilárdtestmodellt alkalmazunk, amelyben a lézertér és az anyag közötti kölcsönhatást explicit módon vesszük figyelembe az időfüggő szemiklasszikus Hamilton-operátorban. A leírás az időfüggő Schrödinger-egyenlet egyelektron-közelítésére épül. A hullámfüggvény időfejlődését split-operator módszerrel oldjuk meg, amely garantálja a numerikus stabilitást és az impulzus finom jellemzőinek megőrzését [12]. Az általunk alkalmazott Green-függvény módszer és komplex elnyelő potenciál kombinált használata lehetőséget ad a rendszer nyílt kvantummechanikai leírására, így a kilépő komponensek is kvantitatívan vizsgálhatók [13]. Ez lényeges előrelépést jelent a zárt rendszerekre korlátozott hagyományos TDSE-megoldásokkal szemben.

A numerikus vizsgálatok során különféle impulzusparamétereket tesztelünk: az impulzus időtartamát, csúcstérerősségét, burkoló alakját és a CEP értékét. A kilépő töltésáramot a kölcsönhatási tartományon kívül integráljuk, így meghatározható az impulzus által közvetlenül létrehozott töltés. Az eddigi szimulációk alapján a kilépő töltések iránya és mennyisége szignifikánsan változik a CEP függvényében. Megfigyelhető például, hogy a töltésáram polaritása időnként megfordul, amennyiben a CEP eltolódik π radiánnal. Ezzel a tulajdonsággal nemcsak karakterizálható egy adott impulzus, hanem akár olyan vezérelt anyagkölcsönhatások is megvalósíthatók, ahol a töltésirány szándékosan változtatható a fényparaméterek által.

Tovább lépésként célunk a modell általánosítása több rétegű rendszerekre, és ezeknek az elméleti és numerikus vizsgálata olyan anyagkombinációkra, mint például GaN, HfO₂ vagy SiO₂. Az anyagjellemzők (pl. effektív tömeg) különböző beállításai révén az impulzus áthatolása, szóródása is modellezhető.

Összegzésként elmondható, hogy a bemutatott kvantummechanikai modell ígéretes eszközt jelent az ultrarövid impulzusok vizsgálatában, különös tekintettel a vivő-burkoló fázis által befolyásolt töltésáramokra. A módszer érzékenysége, a numerikus implementáció rugalmassága, valamint az elméleti alapok által biztosított értelmezhetőség alkalmassá teszi a modellt kísérleti együttműködések

keretében történő validálásra és alkalmazásra. A kutatás gyakorlati jelentősége abban rejlik, hogy a fény–anyag kölcsönhatás finom paraméterei kvantitatívan befolyásolhatják a detektált töltésáramot, és ez kísérleti visszacsatolást adhat az impulzusok optimalizálásához [9]. A program Python nyelvű implementációban készül, Jupyter notebook környezetben, és nyílt forráskódú formában lesz elérhető GitHub-on, így egyszerűen adaptálható más kutatócsoportok számára is.

Felhasznált irodalom

- [1] Fernando Martin. Attosecond pump-probe spectroscopy of molecular electron dynamics. In APS Division of Atomic, Molecular and Optical Physics Meeting Abstracts, volume 2020 of APS Meeting Abstracts, page C04.004, January 2020.
- [2] Yoel Kissin, Marco Ruberti, Přemysl Kolorenč, and Vitali Averbukh. Attosecond pump–attosecond probe spectroscopy of auger decay. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 23:12376–12386, 2021.
- [3] Steven T. Cundiff, Ferenc Krausz, and Takao Fuji. Carrier-envelope phase of ultrashort pulses. In *Strong Field Laser Physics*, pages 61–89. Springer New York, 2008.
- [4] M. Nisoli, G. Sansone, S. Stagira, J.-P. Caumes, C. Vozzi, S. De Silvestri, M. Pascolini, L. Poletto, P. Villoresi, and G. Tondello. Single-atom effects in high-order harmonic generation: role of carrier-envelope phase in the few-optical-cycle regime. *Applied Physics B: Lasers and Optics*, 78(7-8):873–877, May 2004.
- [5] Weifeng Yang, Xiaohong Song, Shangqing Gong, Ya Cheng, and Zhizhan Xu. Carrier-envelope phase dependence of few-cycle ultrashort laser pulse propagation in a polar molecule medium. *Phys. Rev. Lett.*, 99:133602, Sep 2007.
- [6] Bing Zeng and Lingze Duan. Carrier-envelope phase sensitive inversion driven by few-cycle pulse pairs. *OSA Continuum*, 1(4):1304–1312, Dec 2018.
- [7] Marcel Ruijter, Vittoria Petrillo, Thomas C. Teter, Maksim Valialshchikov, and Sergey Rykovanov. Signatures of the carrier envelope phase in nonlinear thomson scattering. *Crystals*, 11(5):528, May 2021.
- [8] Ferenc Krausz and Mark I. Stockman. Attosecond metrology: from electron capture to future signal processing. *Nature Photonics*, 8(3):205–213, February 2014.
- [9] Václav Hanus, Viktória Csajbók, Zsuzsanna Pápa, Judit Budai, Zsuzsanna Márton, Gellért Zsolt Kiss, Péter Sándor, Pallabi Paul, Adriana Szeghalmi, Zilong Wang, Boris Bergues, Matthias F. Kling, György Molnár, János Volk, and Péter Dombi. Light-field-driven current control in solids with pJ-level laser pulses at 80 MHz repetition rate. *Optica*, 8(4):570, April 2021.
- [10] Maxim Durach, Anastasia Rusina, Matthias F. Kling, and Mark I. Stockman. Predicted ultrafast dynamic metallization of dielectric nanofilms by strong single-cycle optical fields. *Phys. Rev. Lett.*, 107:086602, Aug 2011.
- [11] Agustin Schiffrin, Tim Paasch-Colberg, Nicholas Karpowicz, Vadym Apalkov, Daniel Gerster, Sascha Mühlbrandt, Michael Korbman, Joachim Reichert, Martin Schultze, Simon Holzner, Johannes V. Barth, Reinhard Kienberger, Ralph Ernstorfer, Vladislav S. Yakovlev, Mark I. Stockman, and Ferenc Krausz. Optical-field-induced current in dielectrics. *Nature*, 493(7430):70–74, December 2012.
- [12] David S. Sholl and Janice A. Steckel. *Density Functional Theory*. John Wiley & Sons, Inc., March 2009.
- [13] Carsten A. Ullrich. *Time-Dependent Density-Functional Theory*. Oxford University Press, December 2011.