

XX. reál- és humántudományi Erdélyi Tudományos Diákköri Konferencia
(ETDK) Kolozsvár, 2017. május 18–21.

Atomok ionizációjakor jelentkező nemlineáris folyamatok

Szerző:

Curko Árpád

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár, Fizika Kar, fizika szak, alapképzés, III. év

Témavezető:

dr. Borbély Sándor egyetemi adjunktus,

Babeş-Bolyai Tudományegyetem, Kolozsvár, Fizika Kar, Magyar Fizika Intézet

Tartalomjegyzék

1. Bevezető	1
2. Elméleti háttér és módszerek	1
2.1. Lézerimpulzus	1
2.2. Többfotonos ionizáció	2
2.3. Az időtől függő Schrödinger egyenlet	3
2.4. Az időtől függő perturbációs módszer	5
2.5. A H atom sajátállapotai	7
2.6. Az átmeneti mátrixelemek számolása	8
2.7. Az elsőrendű amplitúdó és az alapállapot kiürülése	10
2.8. A másodrendű amplitúdó	11
2.9. Numerikus számítások	12
3. Eredmények és azok kiértékelése	13
3.1. Elsőrendű közelítés és az egyfotonos ionizáció	13
3.2. Másodrendű közelítés és a kétfotonos ionizáció	17
4. Következtetések és kitekintés	17

1. Bevezető

Az utóbbi évtizedekben, a lézertechnológia rohamos fejlődése révén egyre rövidebb (femto-, attoszekundum nagyságrendű) lézerimpulzusok előállítása vált lehetővé [1]. Ezen időbeli rövidség eredményeképpen nagy energiakoncentráció érhető el, mely olyan mértékű hozzájárulást ad az atombeli térerősségekhez, hogy korábban nem ismert folyamatok tanulmányozása valósítható meg. Ide sorolhatóak: a különböző ionizációs, az attoszekundumos impulzusok előállításához szükséges felharmonikus keltési [2] és lézeres részecskegyorsítással [3] kapcsolatos folyamatok. Sőt a molekuláris folyamatok karakterisztikus idejének (10^{-15} s) tartományába eső impulzusok segítségével, ún. pump-probe módszerekkel már kémiai folyamatok lefolyása és dinamikája is vizsgálhatóvá vált [4, 5].

Miként a fenti esetekben is, az anyaggal kölcsönható elektromágneses tér extrém erősségű, ilyenkor az anyag válasza legtöbb esetben nemlineáris, vagyis a válaszfüggvény a bejövő lézertér intenzitásának nemlineáris függvénye. Ezen folyamatok egzakt elméleti vizsgálatát az időtől függő Schrödinger egyenlet (TDSE) megoldása tenné lehetővé [2], viszont ennek numerikus megoldása nagy teljesítményű processzort, sok időt és memóriát igényel. Így célszerű lenne más közelítő módszerhez folyamodni, dolgozatomban célja tehát: *a hidrogén atom rövid lézerimpulzusok általi ionizációja során jelentkező nemlineáris folyamatok elméleti leírása az időtől függő perturbációs módszer segítségével*. Ezen közelítés helyességét pedig a TDSE numerikus megoldásainak [6] (referencia) összehasonlításával vizsgálom meg.

2. Elméleti háttér és módszerek

2.1. Lézerimpulzus

A fényimpulzusok elektromágneses hullámcsomagok, ezért az idő- és térfüggő elektromos térerősséggel leírhatóak [4, 2]. Az ω_0 körfrekvenciájú és $k = \frac{\omega_0}{c}$ hullámszámú, lineárisan polarizált síkhullám elektromos térerősségvektora megadható, mint:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{\epsilon} E_0 \sin(\omega_0 t - \vec{k}\vec{r} + \phi_0) \quad (1)$$

ahol $\vec{\epsilon}$ a polarizációs vektor. Az (1)-es egyenlethez hasonlóan a lineárisan polarizált lézerimpulzus esetében is az elektromos térerősségvektor felírható, mint:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{\epsilon} E_0(t) \sin(\omega_0 t - \vec{k}\vec{r} + \phi(t)) \quad (2)$$

A (2)-es egyenletből látszik, hogy a lézerimpulzust a következő mennyiségek határozzák meg: $E_0(t)$ az időtől függő amplitúdó (burkoló), ω_0 a központi (vívő, hordozó) frekvencia és $\phi(t)$ a fázisfüggvény. A pillanatnyi vívőfrekvenciát pedig a következőképpen kapjuk meg:

$$\omega(t) = \frac{d(\omega_0 t + \phi(t))}{dt} \quad (3)$$

A továbbiakban a τ időtartamú lézerpulzust a következőképpen adjuk meg:

$$\begin{aligned} E_0(t) &= E_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right), \text{ ha } t \in (0, \tau), \text{ különben } E_0(t) = 0 \\ \phi(t) &= \phi_0 = -\frac{\omega_0 \tau}{2} + \frac{\pi}{2} \\ \vec{E}(\vec{r}, t) &= \vec{\epsilon} E_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) \sin\left(\omega_0 t - \vec{k}\vec{r} - \frac{\omega_0 \tau}{2} + \frac{\pi}{2}\right) \end{aligned} \quad (4)$$

A térfüggéstől eltekintve ($E(t) = E_0(t) \sin(\omega_0 t + \phi_0)$), a térerősség komplex spektrumát megkaphatjuk a Fourier-transzformáció segítségével:

$$\tilde{E}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} E(t) e^{-i\omega t} dt = U(\omega) e^{i\phi(\omega)} \quad (5)$$

ahol $U(\omega)$ a spektrális amplitúdó és $\phi(\omega)$ a spektrális fázis. A lézerpulzus hossza és a spektrum szélessége ($\Delta\omega$) között a következő összefüggés adódik:

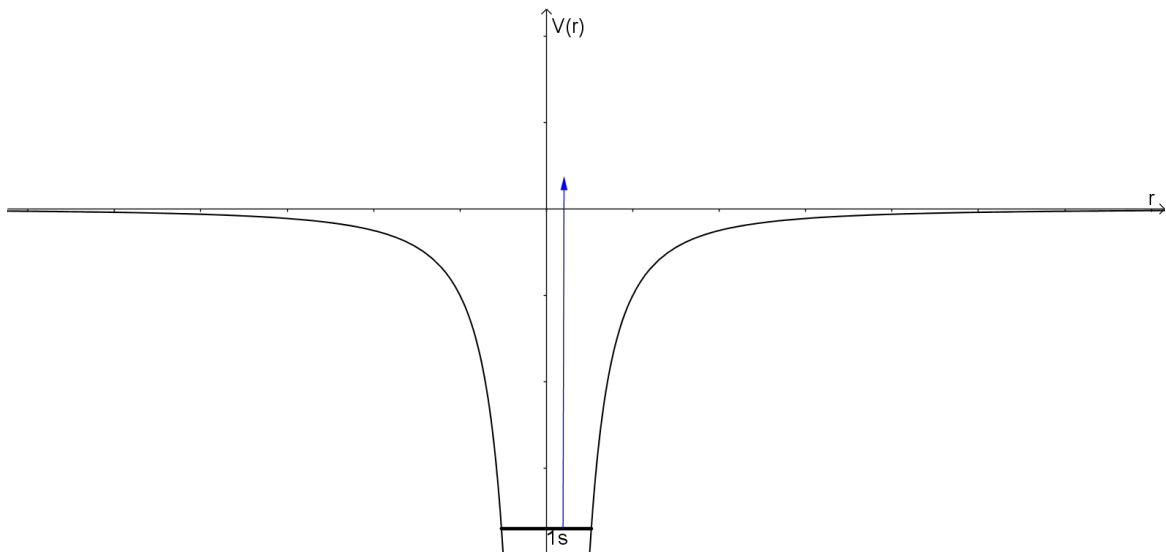
$$\Delta\omega \sim \frac{1}{\tau} \quad (6)$$

Vagyis minél rövidebb a lézerpulzusa időbeli hossza, annál szélesebb az őt alkotó fotonok energiaspektruma.

2.2. Többfotonos ionizáció

Kis intenzitás esetében az atomban kötött elektronnak csak egy foton elnyelése révén van lehetősége szabaddá válni, ha az elnyelt foton energiája meghaladja az ionizációs potenciált (1. ábra). Ekkor az Einstein-egyenlet alapján a szabaddá vált elektron mozgási energiája:

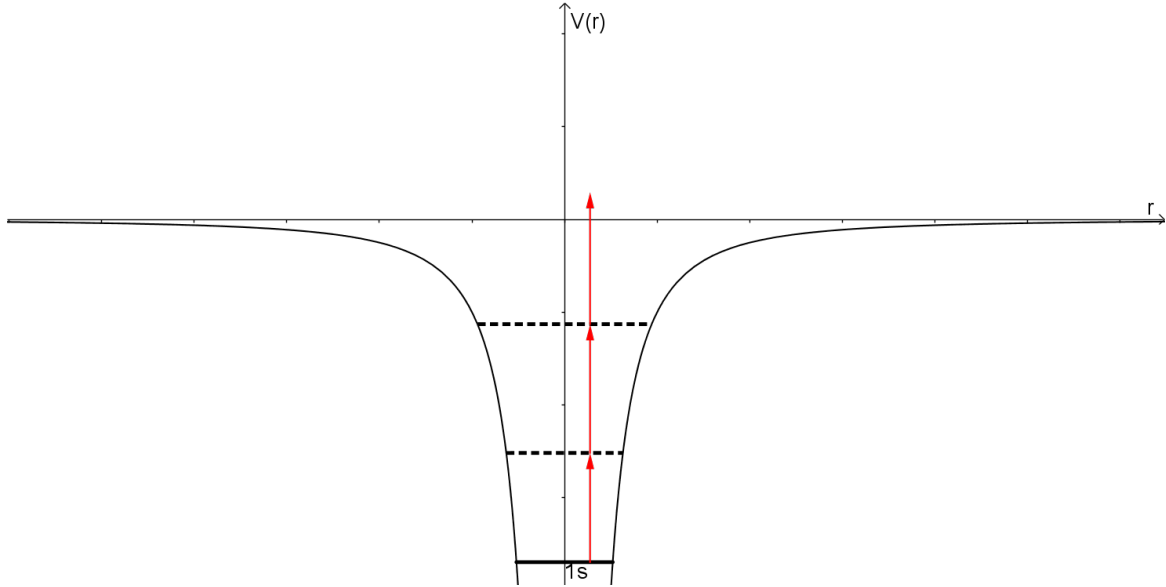
$$E_c = \hbar\omega - I_p \quad (7)$$



1. ábra. Az egyfotonos ionizáció

Az intenzitást növelve olyan hullámhossz esetén is végbemehet az ionizáció, melynek energiája ehhez nem volna elegendő. Ez a jelenség a többfotonos ionizáció: az elektron egyszerre több foton elnyelése révén képes szabaddá válni (2. ábra):

$$E_c = n\hbar\omega - I_p \quad (8)$$



2. ábra. A többfotonos ionizáció

2.3. Az időtől függő Schrödinger egyenlet

Az elektron elektromágneses mezőben

Az elektromágneses mezőben lévő elektron Hamilton függvénye, tetszőleges mértékben, megadható a $\phi(\vec{r}, t)$ skalár- és az $\vec{A}(\vec{r}, t)$ vektorpotenciál segítségével [2]:

$$\begin{aligned} H(t) &= \frac{1}{2m}(\vec{p} + e\vec{A})^2 - e\phi \\ &= \frac{\vec{p}^2}{2m} + \frac{e}{2m}(\vec{A}\vec{p} + \vec{p}\vec{A}) + \frac{e^2}{2m}\vec{A}^2 - e\phi \end{aligned} \quad (9)$$

ahol \vec{p} az elektron impulzusa, m a tömege és e az elemi töltés. Koordináta reprezentációt használva és áttérve operátorokra ($\hat{p} = -i\hbar\nabla$), megkapjuk a Hamilton operátort:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - i\hbar\frac{e}{2m}(\vec{A}\nabla + \nabla\vec{A}) + \frac{e^2}{2m}\vec{A}^2 - e\phi \quad (10)$$

Coulomb mértéket használva ($\nabla\vec{A} = 0$) és tudva, hogy az üres térben $\phi = 0$, a (10) a következőképpen alakul:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - i\hbar\frac{e}{m}\vec{A}\nabla + \frac{e^2}{2m}\vec{A}^2 \quad (11)$$

ahol felhasználtuk a Coulomb mértékből adódó tulajdonságot:

$$\begin{aligned}\nabla(\vec{A}\Psi) &= \vec{A}(\nabla\Psi) + (\nabla\vec{A})\Psi \\ &= \vec{A}(\nabla\Psi)\end{aligned}\quad (12)$$

A H atomban kötött elektron elektromágneses mezőben

A (11)-es egyenlethez még hozzá kell adnunk az elektron és a mag közötti $-e^2/(4\pi\epsilon_0 r)$ elektrosztatikus potenciált:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} - i\hbar\frac{e}{m}\vec{A}\nabla + \frac{e^2}{2m}\vec{A}^2 \quad (13)$$

Az így kapott Hamilton operátor két részre szedhető: \hat{H}_0 az időtől független hidrogén Hamilton operátor, ami leírja a hidrogén atomot az elektromágneses tér hiányában és $\hat{H}_{int}(t)$ leírja a hidrogén atom kölcsönhatását az elektromágneses térrel:

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \\ \hat{H}_{int}(t) &= -i\hbar\frac{e}{m}\vec{A}\nabla + \frac{e^2}{2m}\vec{A}^2\end{aligned}\quad (14)$$

A dipól közelítés és a hosszúságmérték

Az elektromos térerősség - és mágneses indukció vektor megadható a skalár- és vektorpotenciálok segítségével (lézertér esetében a következőképpen alakul):

$$\begin{aligned}\vec{E}(\vec{r}, t) &= -\nabla\phi(\vec{r}, t) - \frac{\partial\vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\partial\vec{A}(\vec{r}, t)}{\partial t} \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= \nabla \times \vec{A}(\vec{r}, t)\end{aligned}\quad (15)$$

Mivel a lézerimpulzus hullámhossza több nagyságrenddel nagyobb az atom karakterisztikus méreténél, eltekinthetünk az elektromos térerősség koordinátától való függésétől: $\vec{E}(\vec{r}, t) \approx \vec{E}(t)$, ezt nevezzük dipól közelítésnek:

$$\begin{aligned}\vec{E}(t) &= -\frac{d\vec{A}(t)}{dt} \\ \vec{B}(t) &= \nabla \times \vec{A}(t) = 0\end{aligned}\quad (16)$$

Vagyis a (13)-as egyenlet:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - i\hbar\frac{e}{m}\vec{A}(t)\nabla + \frac{e^2}{2m}\vec{A}(t)^2 \quad (17)$$

A valós fizikai jelentéssel bíró elektromos térerősség - és mágneses indukció vektorok invariánsak a mértéktranszformációkkal szemben ($\vec{A} \rightarrow \vec{A}', \phi \rightarrow \phi'$):

$$\begin{aligned}\vec{A}' &= \vec{A} + \nabla f \\ \phi' &= \phi - \frac{\partial f}{\partial t}\end{aligned}\quad (18)$$

ahol $f = f(\vec{r}, t)$ egy tetszőleges valós, differenciálható függvény. Az $f = -\vec{A}(t)\vec{r}$ választva a hosszúságmértékhez jutunk:

$$\begin{aligned}\vec{A}' &= \vec{A}(t) + \nabla(-\vec{A}(t)\vec{r}) = \vec{A}(t) - \vec{A}(t) = 0 \\ \phi' &= 0 + \frac{\partial(\vec{A}(t)\vec{r})}{\partial t} = \frac{d\vec{A}(t)}{dt}\vec{r} = -\vec{E}(t)\vec{r}\end{aligned}\quad (19)$$

Felhasználva a (10)-es és (19)-es összefüggéseket a Hamilton operátor a következőképpen módosul:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + e\vec{E}(t)\vec{r}\quad (20)$$

A fenti ismeretében felírhatjuk az időtől függő Schrödinger egyenletet:

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi(t)\rangle}{\partial t} = (\hat{H}_0 + e\vec{E}(t)\vec{r})|\Psi(t)\rangle\quad (21)$$

A továbbiakban viszont az időtől függő perturbációs módszerrel tanulmányozzuk a lézerimpulzus - hidrogén atom kölcsönhatást.

2.4. Az időtől függő perturbációs módszer

Amit már láttuk (lásd (14)-es egyenletek) az időtől függő Hamilton operátor felírható az időtől független (\hat{H}_0) és a lézertérrel való kölcsönhatást leíró időtől függő ($\hat{H}_{int}(t)$) operátorok összegeként. A továbbiakban a \hat{H}_0 -t perturbálatlan Hamilton operátornak nevezzük, míg a $\lambda\hat{H}_{int}(t)$ -t egy elegendően kis, időtől függő perturbációnak tekintjük [7].

Tegyük fel, hogy ismerjük a \hat{H}_0 -hoz tartozó E_k sajátértékeket és a hozzájuk tartozó $|\Psi_k\rangle$ sajátfüggvényeket (melyek ortonormált rendszert alkotnak):

$$\hat{H}_0|\Psi_k\rangle = E_k|\Psi_k\rangle\quad (22)$$

a perturbálatlan Schrödinger egyenlet:

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi_0(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}_0|\Psi_0(t)\rangle\quad (23)$$

melynek megoldása a következőképpen adható meg:

$$|\Psi_0(t)\rangle = \sum_k c_k^{(0)}|\Psi_k\rangle \exp\left(-i\frac{E_k t}{\hbar}\right)\quad (24)$$

Mivel a $|\Psi_k\rangle$ függvények egy teljes rendszert alkotnak, az időtől függő Schrödinger-egyenlet $i\hbar\frac{\partial|\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t)|\Psi(t)\rangle$ általános megoldása kifejezhető:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_k c_k(t)|\Psi_k\rangle \exp\left(-i\frac{E_k t}{\hbar}\right)\quad (25)$$

Feltéve, hogy a $|\Psi\rangle$ egyre normált, a $|c_k(t)|^2$ mennyiség annak a valószínűsége, hogy a rendszer a t . időpillanatban a k . állapotban legyen, a $c_k(t)$ az ennek megfelelő valószínűségi amplitúdó. Ahhoz, hogy megkapjuk ezen együtthatókat a (25)-ös kifejtést behelyettesítjük a Schrödinger egyenletbe:

$$i\hbar \sum_k \left[\dot{c}_k(t) |\Psi_k\rangle \exp\left(-i\frac{E_k t}{\hbar}\right) - i\frac{E_k}{\hbar} c_k(t) |\Psi_k\rangle \exp\left(-i\frac{E_k t}{\hbar}\right) \right] = \sum_k \left[\hat{H}_0 c_k(t) |\Psi_k\rangle \exp\left(-i\frac{E_k t}{\hbar}\right) + \lambda \hat{H}_{int}(t) c_k(t) |\Psi_k\rangle \exp\left(-i\frac{E_k t}{\hbar}\right) \right] \quad (26)$$

Felhasználva a (22)-es összefüggést:

$$i\hbar \sum_k \dot{c}_k(t) |\Psi_k\rangle \exp\left(-i\frac{E_k t}{\hbar}\right) = \sum_k \lambda \hat{H}_{int}(t) c_k(t) |\Psi_k\rangle \exp\left(-i\frac{E_k t}{\hbar}\right) \quad (27)$$

Az előbbi egyenletet megszorozva $\langle\Psi_f|$ -vel ($\langle\Psi_f|\Psi_k\rangle = \delta_{fk}$) a következőt kapjuk:

$$\begin{aligned} \dot{c}_f(t) &= -\frac{i}{\hbar} \sum_k c_k(t) \lambda \langle\Psi_f| \hat{H}_{int}(t) |\Psi_k\rangle \exp\left(i\frac{(E_f - E_k)t}{\hbar}\right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_k c_k(t) \lambda \langle\Psi_f| \hat{H}_{int}(t) |\Psi_k\rangle e^{i\omega_{fk}t} \end{aligned} \quad (28)$$

ahol $\omega_{fk} = \frac{E_f - E_k}{\hbar}$.

Ha a perturbáció ($\lambda \hat{H}_{int}(t)$) kicsi, a $c_k(t)$ a λ hatványai szerint sorbafejthető:

$$c_k(t) = c_k^{(0)}(t) + \lambda c_k^{(1)}(t) + \lambda^2 c_k^{(2)}(t) + \dots \quad (29)$$

Ezt behelyettesítve a (28)-ba és az azonos hatványú együtthatókat egyenlővé téve:

$$\begin{aligned} \dot{c}_f^{(0)}(t) &= 0 \\ \dot{c}_f^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \sum_k \langle\Psi_f| \hat{H}_{int}(t) |\Psi_k\rangle e^{i\omega_{fk}t} c_k^{(0)}(t) \\ &\dots \\ \dot{c}_f^{(s+1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \sum_k \langle\Psi_f| \hat{H}_{int}(t) |\Psi_k\rangle e^{i\omega_{fk}t} c_k^{(s)}(t) \end{aligned} \quad (30)$$

Amint a (30)-ból látszik, a $c_k^{(0)}$ együtthatók időtől függetlenek. Feltételezve, hogy a rendszer a $t = t_0$ időpontban az ismert $|\Psi_i\rangle$ stacionárius állapotban van ($c_k^{(0)} = \delta_{ki}$):

$$\begin{aligned} c_f^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \langle\Psi_f| \hat{H}_{int}(t') |\Psi_i\rangle e^{i\omega_{fi}t'} dt' \\ c_f^{(2)}(t) &= \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \sum_k \left[\int_{t_0}^t \langle\Psi_f| \hat{H}_{int}(t') |\Psi_k\rangle e^{i\omega_{fk}t'} \times \right. \\ &\quad \left. \times \left(\int_{t_0}^{t'} \langle\Psi_k| \hat{H}_{int}(t'') |\Psi_i\rangle e^{i\omega_{ki}t''} dt'' \right) dt' \right] \end{aligned} \quad (31)$$

A harmad- és magasabb rendű tagokat elhanyagolva megkapjuk a másodrendű amplitúdót ($\lambda = 1$):

$$c_f^2(t) = c_f^{(1)}(t) + c_f^{(2)}(t) \quad (32)$$

Ennek modulusnégyzete megadja annak a valószínűségét (folytonos állapotok esetén valószínűsűrsűrűségét), hogy a $|\Psi_i\rangle$ kezdeti állapotból a rendszer a $\hat{H}_{int}(t)$ perturbáció hatására a t . időpillanatban a $|\Psi_f\rangle$ végállapotba jusson.

2.5. A H atom sajátállapotai

A $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ Coulomb-potenciálban mozgó elektron esetén a kötött állapotokra ($E < 0$, megoldva a (22)-es egyenletet) a következőt kapjuk:

$$|\Psi_{nlm}\rangle = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (33)$$

ahol a radiális rész ($L_\alpha^\beta(x)$ általánosított Laguerre-polinom) [8]:

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-1-l)!}{2n(n+l)!}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \quad (34)$$

és a szögfüggő rész ($P_l^m(x)$ l-ed rendű általánosított Legendre-polinom):

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \quad (35)$$

A $\hbar\vec{k}$ asszimptotikus impulzussal jellemezhető szórás (Coulomb-hullámfüggvény) állapotok ($E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0$) pedig [8]:

$$\begin{aligned} \Psi_C(\vec{k}, \vec{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l e^{i\sigma_l} F_l(\gamma, kr) P_l(\cos\theta) = \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l i^l e^{i\sigma_l} F_l(\gamma, kr) Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta_k, \phi_k) \end{aligned} \quad (36)$$

ahol:

$$\vec{r} = \vec{r}(r, \theta, \phi)$$

$$\vec{k} = \vec{k}(k, \theta_k, \phi_k)$$

$$\gamma = -\frac{1}{k}$$

$$\sigma_l = \arg(\Gamma(l+1+i\gamma))$$

$$P_l(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta_k, \phi_k)$$

$F_l(\gamma, kr)$ radiális Coulomb-hullámfüggvény

A (36)-os egyenletet továbbírva:

$$\begin{aligned}\Psi_C(\vec{k}, \vec{r}) &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{kr} i^l e^{i\sigma_l} F_l(\gamma, kr) Y_{lm}(\theta, \phi) Y_{lm}^*(\theta_k, \phi_k) = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \tilde{\Psi}_C(k, l, m, \vec{r}) Y_{lm}^*(\theta_k, \phi_k) \quad (37)\end{aligned}$$

A számítások leegyszerűsítése érdekében az átmeneti mátrixelemek számításánál a $\tilde{\Psi}_C(k, l, m, \vec{r})$ hullámfüggvénnyel dolgozunk.

A továbbiakban az atomi egységek rendszerét használjuk:

$$m_e = 1 \text{ (elektron tömege)}$$

$$e = 1 \text{ (elemi töltés)}$$

$$a_0 = 1 \text{ (Bohr sugár)}$$

$$\hbar = 1 \text{ (redukált Planck-állandó)}$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 1 \text{ (Coulomb-féle arányossági tényező)}$$

$$E_{1s} = -0.5 \text{ (1s alapállapot energiája)}$$

2.6. Az átmeneti mátrixelemek számolása

Úgy az első-, mind a másodrendű tagok kiszámításánál (lásd (31)-es egyenletek) szükségünk van a különböző $\langle \Psi_b | \hat{H}_{int}(t) | \Psi_a \rangle$ mennyiségek ismeretére. Behelyettesítve a lézertérrel való kölcsönhatást leíró operátort ($\hat{H}_{int}(t) = e\vec{E}(t)\vec{r}$) és felhasználva az elektromos térerősség (4)-es alakját a következőt kapjuk:

$$\langle \Psi_b | \hat{H}_{int}(t) | \Psi_a \rangle = E_0 \langle \Psi_b | \vec{e}\vec{r} | \Psi_a \rangle \sin\left(\omega t - \frac{\omega\tau}{2} + \frac{\pi}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) \quad (38)$$

A polarizációs vektort az Oz tengely irányába helyezve ($\vec{e} = (1, 0, 0)$) az $M_{ba} = \langle \Psi_b | \vec{e}\vec{r} | \Psi_a \rangle$ átmeneti mátrixelem a következőképpen módosul:

$$M_{ba} = \langle \Psi_b | r \cos \theta | \Psi_a \rangle \quad (39)$$

A fenti képletbe behelyettesítve a perturbálatlan H atom sajátállapotait (lásd (33)-(37)-es egyenletek) megkapjuk a különböző átmenetek mátrixelemeit:

1. Két kötött állapot közötti átmenet ($n, l, 0 \rightarrow n', l', 0$):

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_{n'l'0} | r \cos \theta | \Psi_{nl0} \rangle &= \langle R_{n'l'} | r | R_{nl} \rangle \langle Y_{l'0} | \cos \theta | Y_{l0} \rangle = \\
&= \left[\int_0^\infty \sqrt{\left(\frac{2}{n'}\right)^3 \frac{(n'-1-l')!}{2n'(n'+l')!}} \left(\frac{2r}{n'}\right)^{l'} e^{-\frac{r}{n'}} L_{n'-l'-1}^{2l'+1}(2r/n') \times \right. \\
&\times \left. r \sqrt{\left(\frac{2}{n}\right)^3 \frac{(n-1-l)!}{2n(n+l)!}} \left(\frac{2r}{n}\right)^l e^{-\frac{r}{n}} L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/n) dr \right] \times \\
&\times \left[\sqrt{\frac{l^2}{(2l-1)(2l+1)}} \delta_{l',l-1} + \sqrt{\frac{(l+1)^2}{(2l+1)(2l+3)}} \delta_{l',l+1} \right] = \\
&= \sqrt{\frac{(n'-1-l')!(n-1-l)!}{4n'n(n'+l')!(n+l)!}} \left(\frac{2}{n'}\right)^{l'+\frac{3}{2}} \left(\frac{2}{n}\right)^{l+\frac{3}{2}} \times \\
&\times \int_0^\infty e^{(\frac{-r}{n'}+\frac{-r}{n})} r^{l'+l+1} L_{n'-l'-1}^{2l'+1}(2r/n') L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/n) dr \times \\
&\times \left[\sqrt{\frac{l^2}{(2l-1)(2l+1)}} \delta_{l',l-1} + \sqrt{\frac{(l+1)^2}{(2l+1)(2l+3)}} \delta_{l',l+1} \right] \quad (40)
\end{aligned}$$

ahol felhasználtam [9]:

$$\begin{aligned}
\langle Y_{l'm'} | \cos \theta | Y_{lm} \rangle &= \sqrt{\frac{(l-m)(l+m)}{(2l-1)(2l+1)}} \delta_{l',l-1} \delta_{m',m} + \\
&+ \sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} \delta_{l',l+1} \delta_{m',m} \quad (41)
\end{aligned}$$

2. Két szórási állapot közötti átmenet ($k, l_k, 0 \rightarrow k', l'_k, 0$):

$$\begin{aligned}
\langle \tilde{\Psi}_{Ck'l'_k0} | r \cos \theta | \tilde{\Psi}_{Ckl_k0} \rangle &= \\
&= \int_r \int_\theta \int_\phi \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{k'r} (-i)^{l'_k} e^{-i\sigma_{l'_k}} F_{l'_k}(\gamma', k'r) Y_{l'_k0}^*(\theta, \phi) \times \\
&\times r \cos \theta \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{k'r} i^{l_k} e^{i\sigma_{l_k}} F_{l_k}(\gamma, kr) Y_{l_k0}(\theta, \phi) r^2 \sin \theta d\phi d\theta dr = \\
&= \frac{2}{\pi} \frac{1}{k'l'_k} (-i)^{l'_k} i^{l_k} e^{-i\sigma_{l'_k} + i\sigma_{l_k}} \int_0^\infty F_{l'_k}(\gamma', k'r) F_{l_k}(\gamma, kr) r dr \times \\
&\times \langle Y_{l'_k0} | \cos(\theta) | Y_{l_k0} \rangle = \\
&= \frac{2}{\pi} \frac{1}{k'l'_k} (-i)^{l'_k} i^{l_k} e^{-i\sigma_{l'_k} + i\sigma_{l_k}} \int_0^\infty F_{l'_k}(\gamma', k'r) F_{l_k}(\gamma, kr) r dr \times \\
&\times \left[\sqrt{\frac{l_k^2}{(2l_k-1)(2l_k+1)}} \delta_{l'_k, l_k-1} + \sqrt{\frac{(l_k+1)^2}{(2l_k+1)(2l_k+3)}} \delta_{l'_k, l_k+1} \right] \quad (42)
\end{aligned}$$

3. Kötött és szórási állapot közötti átmenet $(n, l, 0 \rightarrow k, l_k, 0)$:

$$\begin{aligned}
\boxed{\langle \tilde{\Psi}_{Ckl_k0} | r \cos \theta | \Psi_{nl0} \rangle} &= \\
&= \int_r \int_\theta \int_\phi \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{kr} (-i)^{l_k} e^{-i\sigma_{l_k}} F_{l_k}(\gamma, kr) Y_{l_k0}^*(\theta, \phi) r \cos \theta \quad \times \\
&\times \sqrt{\left(\frac{2}{n}\right)^3 \frac{(n-1-l)!}{2n(n+l)!} \left(\frac{2r}{n}\right)^l} e^{\frac{-r}{n}} L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/n) Y_{l0}(\theta, \phi) r^2 \sin \theta d\phi d\theta dr = \\
&= \text{sqr}t \frac{2}{\pi} \frac{1}{k} (-i)^{l_k} e^{-i\sigma_{l_k}} \sqrt{\frac{(n-1-l)!}{2n(n+l)!} \left(\frac{2}{n}\right)^{l+\frac{3}{2}}} \quad \times \\
&\times \int_0^\infty F_{l_k}(\gamma, kr) r^{l+2} e^{\frac{-r}{n}} L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/n) dr \langle Y_{l_k0} | \cos(\theta) | Y_{l0} \rangle = \\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{k} (-i)^{l_k} e^{-i\sigma_{l_k}} \sqrt{\frac{(n-1-l)!}{2n(n+l)!} \left(\frac{2}{n}\right)^{l+\frac{3}{2}}} \int_0^\infty \left(F_{l_k}(\gamma, kr) r^{l+2} e^{\frac{-r}{n}} \quad \times \right. \\
&\times \left. L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/n) dr \right) \left(\sqrt{\frac{l^2}{(2l-1)(2l+1)}} \delta_{l_k, l-1} + \sqrt{\frac{(l+1)^2}{(2l+1)(2l+3)}} \delta_{l_k, l+1} \right) \quad (43)
\end{aligned}$$

2.7. Az elsőrendű amplitúdó és az alapállapot kiürülése

A (38)-at behelyettesítve a (31.a)-ba és felhasználva a (39)-et megkapjuk az elsőrendű amplitúdót:

$$c_f^1 = -iE_0 \langle \Psi_f | r \cos \theta | \Psi_i \rangle \int_0^\tau \sin\left(\omega t' - \frac{\omega\tau}{2} + \frac{\pi}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi t'}{\tau}\right) e^{(i\omega_f t')} dt' \quad (44)$$

Az ionizációs valószínűségeket vizsgálva az 1s alapállapotból kiindulva, szükségünk lesz az $(1, 0, 0)$ kötött- és $(k, l_k, 0)$ szórási állapotok közötti mátrixelemre (lásd (43)-as összefüggés, $l_k = 1$):

$$M_{fi} = -\frac{\sqrt{8}}{3\pi} i e^{-i\sigma_1} \frac{1}{k} \int_0^\infty F_1(\gamma, kr) r^2 e^{-r} dr \quad (45)$$

Behelyettesítve a (44)-be és figyelembe véve a (37)-et (a kiszámolt mátrixelemet beszorozzuk az $Y_{10}(\theta_k, \phi_k)$ -val) :

$$\begin{aligned}
c^1(k, \theta_k) &= -\frac{\sqrt{2}E_0}{\pi k} e^{-i\sigma_1} \cos \theta_k \left(\int_0^\infty F_1(\gamma, kr) r^2 e^{-r} dr \right) \quad \times \\
&\times \left(\int_0^\tau \sin\left(\omega t' - \frac{\omega\tau}{2} + \frac{\pi}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi t'}{\tau}\right) e^{(i\omega_f t')} dt' \right) \quad (46)
\end{aligned}$$

Az ionizációs valószínűségeket:

$$\begin{aligned}
\rho(k, \theta_k) &= \frac{2E_0^2}{\pi^2 k^2} \cos^2 \theta_k \left(\int_0^\infty F_1(\gamma, kr) r^2 e^{-r} dr \right)^2 \quad \times \\
&\times \left(\int_0^\tau \sin\left(\omega t' - \frac{\omega\tau}{2} + \frac{\pi}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi t'}{\tau}\right) e^{(i\omega_f t')} dt' \right)^2 \quad (47)
\end{aligned}$$

ahol $\omega_{fi} = E_f(k) - E_{1s} = \frac{k^2}{2} + 0.5$. A teljes ionizációs valószínűség pedig (integrálva a teljes \vec{k} térre):

$$I = \int_0^{2\pi} d\phi_k \int_0^\pi \int_0^\infty \rho(k, \theta_k) k^2 \sin \theta_k dk d\theta_k \quad (48)$$

A modell pontosítása érdekében figyelembe kell vennünk az alapállapot kiürülését az idő előrehaladtával. A $|\Psi_{1s}\rangle$ helyett a $a(t) \cdot |\Psi_{1s}\rangle$ hullámfüggvénnyel számoljunk, ahol a $a(t=0) = 1$, ekkor az alapállapot betöltöttségének valószínűsége $P_{1s} = \langle a(t)\Psi_{1s} | a(t)\Psi_{1s} \rangle = a^2(t)$. A fenti számításokban a lézerpulzus teljes időtartama alatt a $a(t) = 1$ -nek vettük, elhanyagolva az alapállapot populációvesztését. Ezen együtthetőre írhatjuk:

$$a^2(t) \simeq 1 - I(t) \quad (49)$$

ahol $I(t)$ a teljes ionizációs valószínűség a t . időpillanatban és eltekintettünk a gerjesztett állapotok lehetőségétől.

2.8. A másodrendű amplitúdó

A másodrendű tagnál (lásd (31.b)) közbeeső állapotok ($|\Psi_k\rangle$) is számításba vevődnek, melyek kötött és szórás állapotok is lehetnek. Figyelembe véve, hogy a kötött állapotok diszkrét, míg a szórás állapotok folytonosak az összegzés a következőképpen írható:

$$\begin{aligned} c^{(2)}(k_f, l_{k_f}, m_{k_f}) = & -E_0^2 \left\{ \left[\sum_{n,l,m} \langle \tilde{\Psi}_f | r \cos \theta | \Psi_{nlm} \rangle \langle \Psi_{nlm} | r \cos \theta | \Psi_{100} \rangle \times \right. \right. \\ & \times \int_0^\tau \sin\left(\omega t - \frac{\omega\tau}{2} + \frac{\pi}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) e^{i(k_f^2/2 + 0.5/n^2)t} \times \\ & \times \left. \left(\int_0^t \sin\left(\omega t' - \frac{\omega\tau}{2} + \frac{\pi}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi t'}{\tau}\right) e^{i(0.5/n^2 + 0.5)t'} dt' \right) dt \right] + \\ & + \left[\sum_{l_k, m_k} \int_0^\infty \langle \tilde{\Psi}_f | r \cos \theta | \tilde{\Psi}_{C(k, l_k, m_k)} \rangle \langle \tilde{\Psi}_{C(k, l_k, m_k)} | r \cos \theta | \Psi_{100} \rangle \times \right. \\ & \times \left(\int_0^\tau \sin\left(\omega t - \frac{\omega\tau}{2} + \frac{\pi}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) e^{i(k_f^2/2 - k^2/2)t} \times \right. \\ & \times \left. \left. \left(\int_0^t \sin\left(\omega t' - \frac{\omega\tau}{2} + \frac{\pi}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi t'}{\tau}\right) e^{i(k^2/2 + 0.5)t'} dt' \right) dt \right) k^2 dk \right] \left. \right\} \quad (50) \end{aligned}$$

Felhasználva a gömbfüggvényekre vonatkozó (41)-es összefüggést, megkapjuk a kiválasztási szabályokat ($m = m_k = m_{k_f} = 0, l = l_k = 1, l_{k_f} \in \{0, 2\}$) és az (50)-es a következőképpen

egyszerűsödik:

$$\begin{aligned}
c^{(2)}(k_f, l_{k_f}) = -E_0^2 & \left\{ \left[\sum_n \langle \tilde{\Psi}_f | r \cos \theta | \Psi_{n10} \rangle \langle \Psi_{n10} | r \cos \theta | \Psi_{100} \rangle \times \right. \right. \\
& \times \int_0^\tau \sin\left(\omega t - \frac{\omega\tau}{2} + \frac{\pi}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) e^{i(k_f^2/2+0.5/n^2)t} \times \\
& \times \left. \left(\int_0^t \sin\left(\omega t' - \frac{\omega\tau}{2} + \frac{\pi}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi t'}{\tau}\right) e^{i(0.5/n^2+0.5)t'} dt' \right) dt \right] + \\
& + \left[\int_0^\infty \langle \tilde{\Psi}_f | r \cos \theta | \tilde{\Psi}_{C(k,1,0)} \rangle \langle \tilde{\Psi}_{C(k,1,0)} | r \cos \theta | \Psi_{100} \rangle \times \right. \\
& \times \left(\int_0^\tau \sin\left(\omega t - \frac{\omega\tau}{2} + \frac{\pi}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) e^{i(k_f^2/2-k^2/2)t} \times \right. \\
& \times \left. \left. \left. \left(\int_0^t \sin\left(\omega t' - \frac{\omega\tau}{2} + \frac{\pi}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\pi t'}{\tau}\right) e^{i(k^2/2+0.5)t'} dt' \right) dt \right) k^2 dk \right] \right\} \quad (51)
\end{aligned}$$

Az elsőrendű amplitúdóhoz (2.7-es alfejezet) hozzáadva a fenti korrekciós tagot megkapjuk a másodrendű amplitúdót ($c^2(k_f, l_{k_f}) = c^{(1)}(k_f, l_{k_f}) + c^{(2)}(k_f, l_{k_f})$). A k_f, l_{k_f} -ről a k_f, θ_{k_f} -re való áttérést megkapjuk (lásd (37)-es egyenlet):

$$c^2(k_f, \theta_{k_f}) = \sum_{l_{k_f}=0}^2 c^2(k_f, l_{k_f}) Y_{l_{k_f}0}(\theta_{k_f}) \quad (52)$$

A következő alfejezetben a fent bevezetett amplitúdók számolását mutatom be.

2.9. Numerikus számítások

Az elsőrendű amplitúdóban (lásd (46)-os egyenlet) szereplő tér - és idő szerinti integrálokat Simpson-módszer segítségével számoltam ki. A számítások pontosságát konvergenciatesztekkel ellenőriztem: az r szerinti integrálási dobozt $r_{max} = 40$ -nek, az integrálási lépésszámot $n_r = 1000$ -nek a t szerinti integrálási lépésszámot $n_t = 1000$ -nek választva. A teljes ionizációs valószínűséghez (lásd(51)-es egyenlet) a k szerinti integrálási dobozt $k_{max} = 1.5$ -nek, az integrálási lépésszámot $n_k = 1000$ -nek, a θ szerinti integrálási lépésszámot $n_\theta = 100$ -nak választottam.

Az alapállapot kiürülését (lásd (49)-es egyenlet) a következőképpen oldottam meg: minden (k .) időlépésben kiszámoltam a teljes ionizációs valószínűséget (I_k), amelyből megkaptam az $a_{k+1} = \sqrt{1 - I_k}$ súlyfaktort, innen pedig a következő időlépésbeli teljes ionizációs valószínűséget (I_{k+1}), ezt mindaddig megismételtem míg a teljes τ tartományt le nem fedtem.

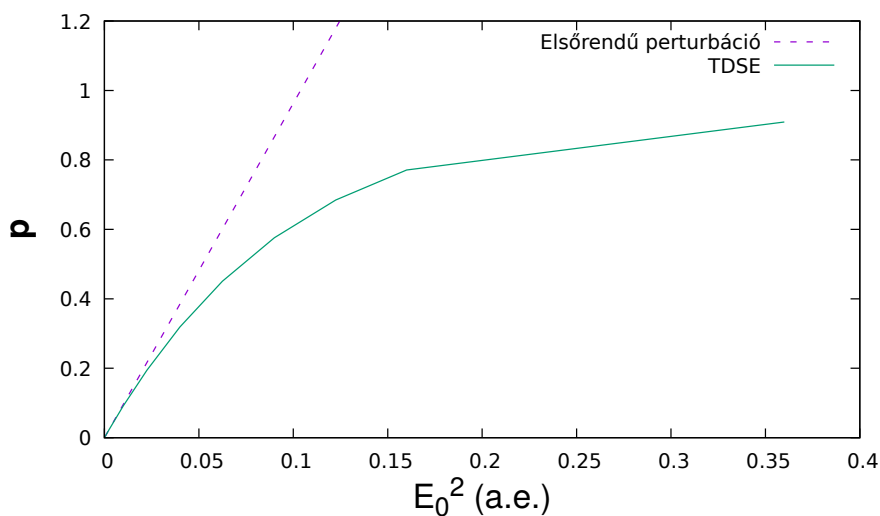
A másodrendű tag esetén (lásd (51)-es egyenlet) mivel az idő szerinti integrál egy dupla integrál a teljes tartományt felosztottam $dt_{out} = \pi/(2\omega n)$, $n = 20$ széles szakaszokra, ezeket pedig további 4 részre ($dt_{in} = dt_{out}/4$), minden kdt_{out} időpillanatban kiszámoltam a belső integrált értékét, ezt felhasználva kaptam meg a teljes időintegrált a $(0, \tau)$ tartományra. Az

átmeneti mátrixelemek számolásánál a közbeeső kötött állapotoknál $n_{max} = 70$ főkvantumszámig mentem el, a közbeeső szórési állapotoknál a maximális asszimptotikus impulzus hosszát $k_{max} = 3$ -nak, míg az integrálási lépésszámot $dk = 0.01$ -nek választottam.

3. Eredmények és azok kiértékelése

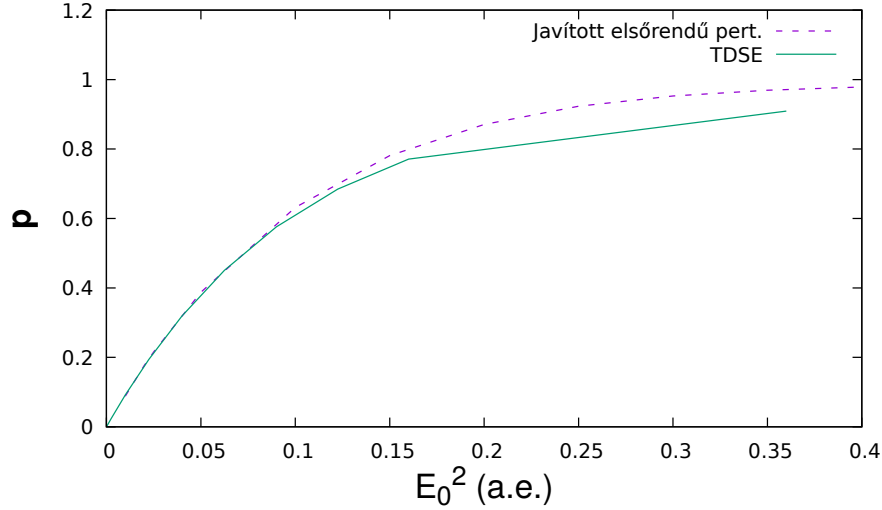
3.1. Elsőrendű közelítés és az egyfotonos ionizáció

Első lépésben rögzítettem a lézerimpulzus hosszát ($10\pi/\omega$ a.e.) és a lézertér intenzitásának ($\sim E_0^2$) függvényében tanulmányoztam a teljes ionizációs valószínűséget (lásd (46-48)-as egyenletek) összehasonlítva a TDSE eredményekkel.



3. ábra. A teljes ionizációs valószínűség az intenzitás függvényében. Az elsőrendű perturbációs modell eredményeit hasonlítottuk össze a TDSE eredményekkel. A lézertér paraméterei: $\omega = 0.75$ a.e., $\tau = 10\pi/\omega$ a.e.

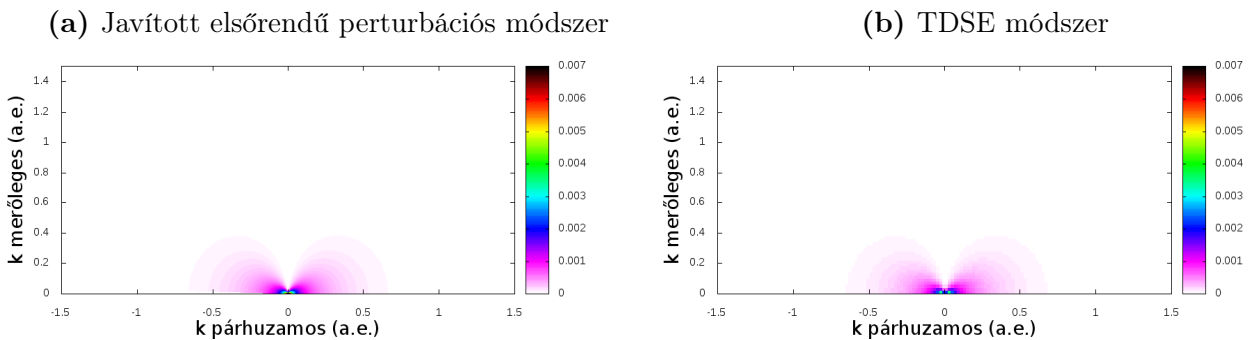
Amint a 3. ábrán látható az így alkalmazott modell csak az $E_0^2 < 0.05$ a.e. intenzitástartományban szolgáltat elfogadható eredményt, e felett a perturbációs módszer által szolgáltatott ionizációs valószínűség lényegesen nagyobb a valós értékekhez képest. Ezen felülbecsülés kiküszöbölésére figyelembe vesszük az alapállapot populációvesztését (lásd a 2.7 alfejezet).



4. ábra. A teljes ionizációs valószínűség az intenzitás függvényében. A javított elsőrendű perturbációs modell eredményeit hasonlítottuk össze a TDSE eredményekkel. A lézertér paramétereii: $\omega = 0.75$ a.e., $\tau = 10\pi/\omega$ a.e.

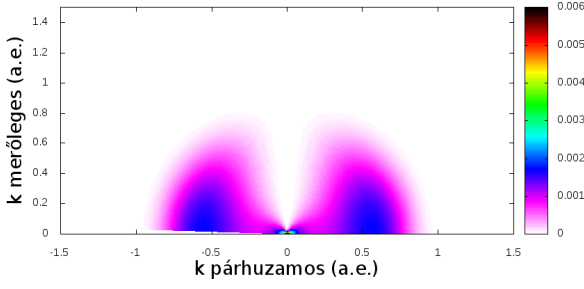
Az alapállapot kiürülésének figyelembe vételével az eredmények lényegesen javultak, így egy széles intenzitástartományra jó egyezést kapunk az egzakt eredményekkel (lásd a 4. ábrát). A nagyobb intenzitások tartományában a fentiek alapján módosított perturbációs módszer is kis mértékben felülbecsüli a TDSE eredményeket, ez a gerjesztett állapotok figyelmen kívül hagyásának tulajdonítható.

A módosított modellt használva vizsgáltam az ionizációs valószínűségrűsűséget az $E_0 = 0.011$ a.e. elektromos térerősségre különböző lézerimpulzus hosszakra. A $\rho(\vec{k})$ -t ábrázoltam a lézertér polarizációs irányára merőleges (k_{xy}) és azzal párhuzamos (k_z) elektronimpulzus függvényében (5-7. ábrák).

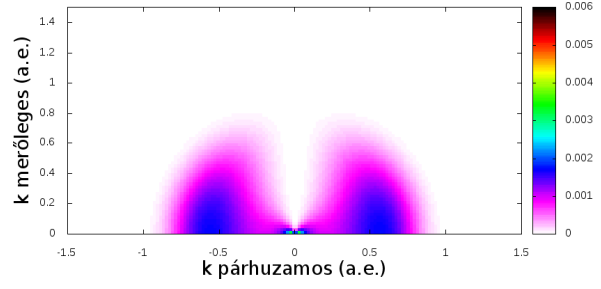


5. ábra. Az ionizációs valószínűségrűsűség az elektronimpulzus függvényében. A lézertér paramétereii: $\omega = 0.75$ a.e., $\tau = \pi/\omega$ a.e., $E_0 = 0.011$ a.e.

(a) Javított elsőrendű perturbációs módszer

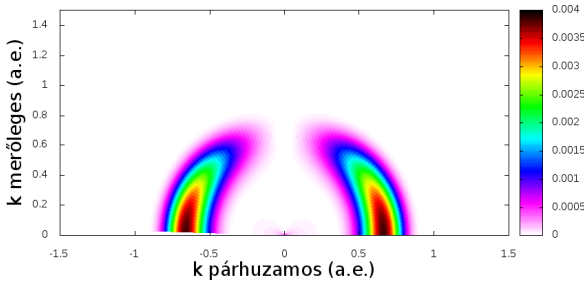


(b) TDSE módszer

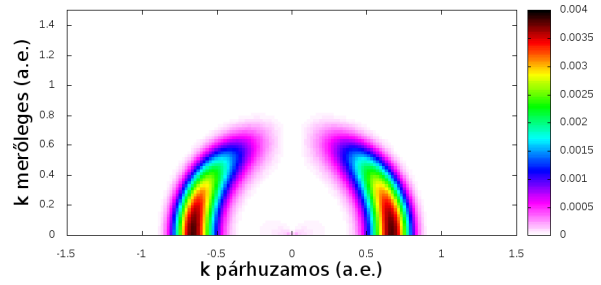


6. ábra. Az ionizációs valószínűsége sűrűség az elektronimpulzus függvényében. A lézertér paramétereit: $\omega = 0.75$ a.e., $\tau = 9\pi/\omega$ a.e., $E_0 = 0.011$ a.e.

(a) Javított elsőrendű perturbációs módszer



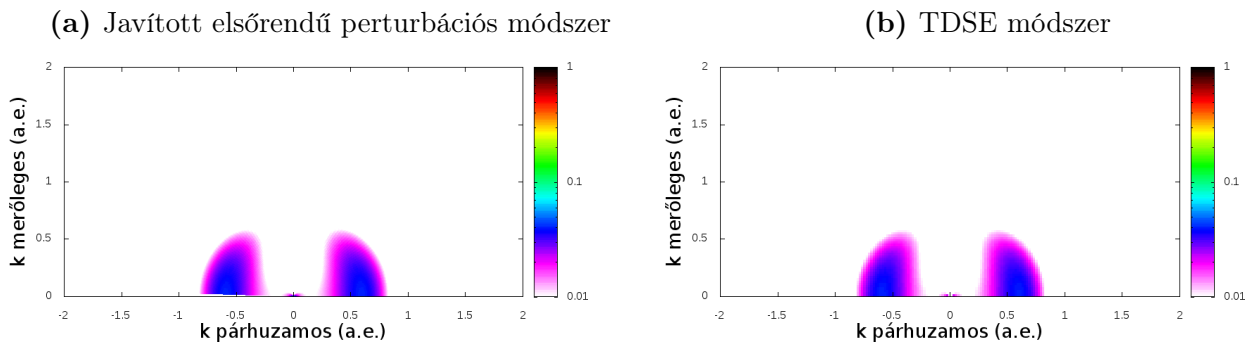
(b) TDSE módszer



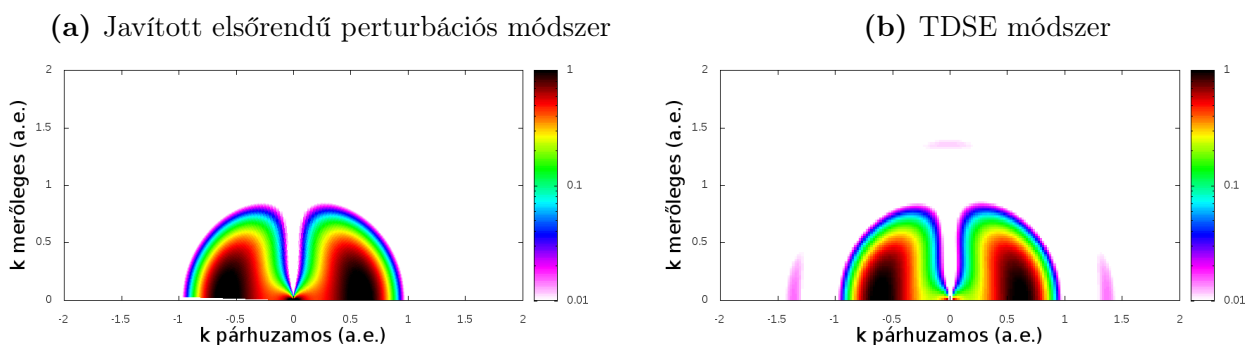
7. ábra. Az ionizációs valószínűsége sűrűség az elektronimpulzus függvényében. A lézertér paramétereit: $\omega = 0.75$ a.e., $\tau = 15\pi/\omega$ a.e., $E_0 = 0.011$ a.e.

A 5-7. ábrákon látható, hogy a perturbációs és TDSE valószínűsége sűrűségek jó egyezést mutatnak. A fizikai megfontolások alapján elvárt dipól eloszlás is megfigyelhető. Az ionizációs valószínűsége sűrűségek maximumát az egyfotonos ionizációnak megfelelően (lásd (7)-es egyenlet) $k = 0.7$ körül kapjuk. Továbbá a 2.1. alfejezetben tárgyaltak alapján (a lézerimpulzus időbeli hosszával fordítottan arányosan változik az őt alkotó fotonok spektrumának szélessége) a rövid lézerimpulzusok esetén széles $\rho(\vec{k})$ eloszlást kaptunk, ami a lézerimpulzus hosszának növelésével elkezdett keskenyedni.

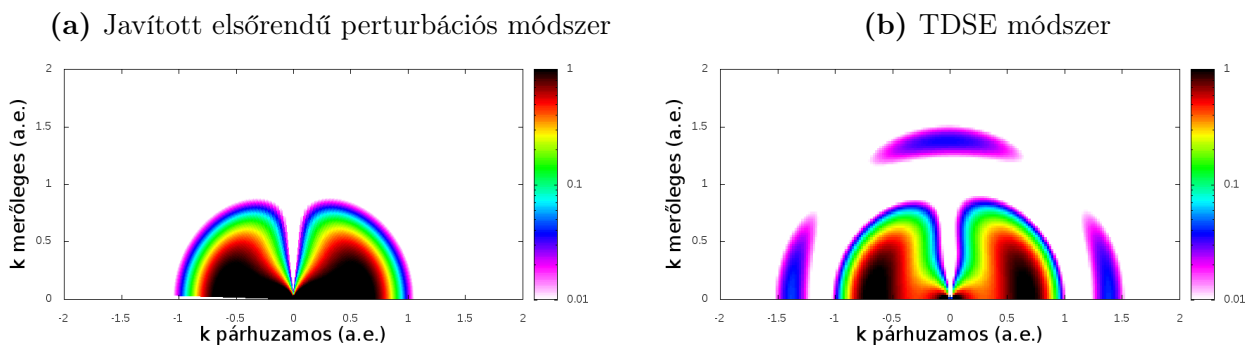
A továbbiakban a τ -t rögzítve ($10\pi/\omega$) és a lézertér intenzitását változtatva vizsgáljuk az ionizációs valószínűsége sűrűséget (8-10. ábrák).



8. ábra. Az ionizációs valószínűsége sűrűség az elektronimpulzus függvényében. A lézertér paramétereit: $\omega = 0.75$ a.e., $\tau = 10\pi/\omega$ a.e., $E_0 = 0.05$ a.e.



9. ábra. Az ionizációs valószínűsége sűrűség az elektronimpulzus függvényében. A lézertér paramétereit: $\omega = 0.75$ a.e., $\tau = 10\pi/\omega$ a.e., $E_0 = 0.35$ a.e.

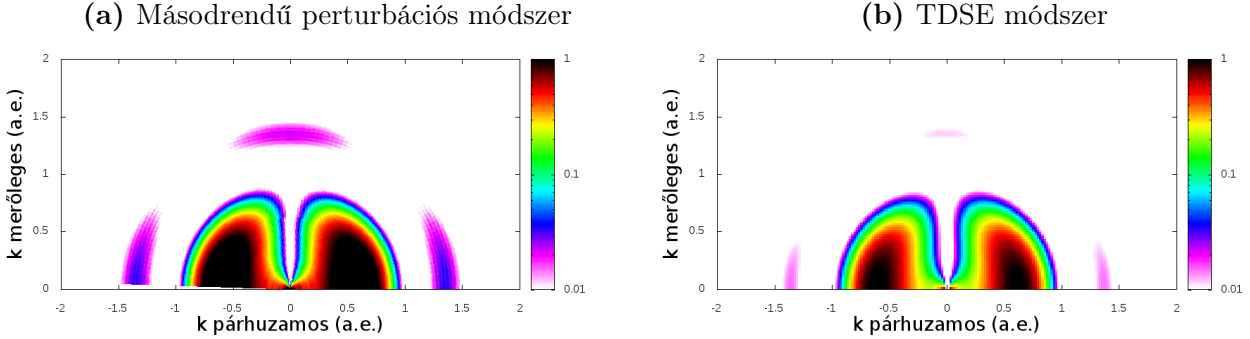


10. ábra. Az ionizációs valószínűsége sűrűség az elektronimpulzus függvényében. A lézertér paramétereit: $\omega = 0.75$ a.e., $\tau = 10\pi/\omega$ a.e., $E_0 = 0.6$ a.e.

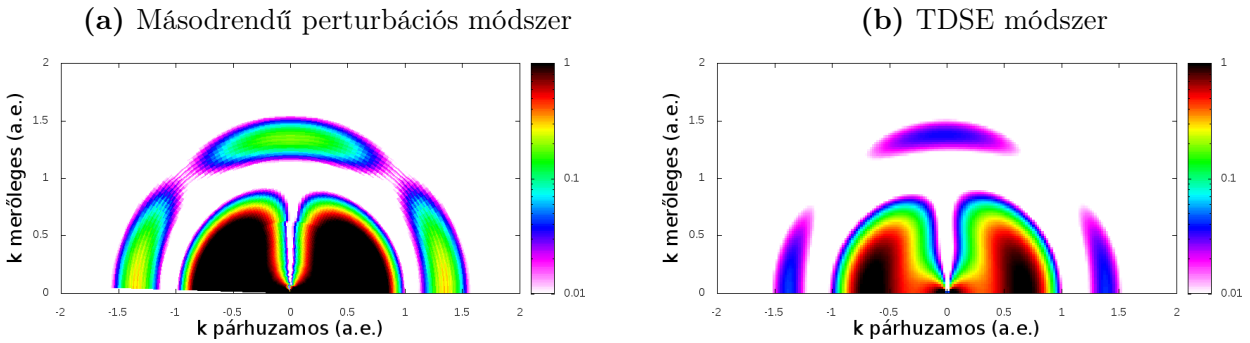
Amint a 8-10. ábrákon látható a domináns egyfoton-ionizációs csúcsok mindkét modell esetében megegyeznek (az $E_0 = 0.6$ a.e.-nél a perturbációs módszer kissé felülbecsüli az ionizációs valószínűsége sűrűségét), viszont a TDSE módszer eredményeiben a kétfoton-ionizációs csúcsok is megjelennek (9., 10. ábrák). A következő alfejezetben a másodrendű perturbációs módszer segítségével próbáljuk meg leírni a többfotonos ionizációt.

3.2. Másodrendű közelítés és a kétfotonos ionizáció

A továbbiakban a másodrendű amplitúdó (lásd 2.8. alfejezet) felhasználásával tanulmányoztam a lézerimpulzus általi ionizációs valószínűségeket eltekintve az alapállapot kiürülésétől, ugyanazon lézertér paramétereket használva, mint a 3.1. alfejezetben tárgyalt utolsó két esetben.



11. ábra. Az ionizációs valószínűsége sűrűség az elektronimpulzus függvényében. A lézertér paraméterei: $\omega = 0.75$ a.e., $\tau = 10\pi/\omega$ a.e., $E_0 = 0.35$ a.e.



12. ábra. Az ionizációs valószínűsége sűrűség az elektronimpulzus függvényében. A lézertér paraméterei: $\omega = 0.75$ a.e., $\tau = 10\pi/\omega$ a.e., $E_0 = 0.6$ a.e.

A 11., 12. ábrákból látszik, hogy TDSE modellhez hasonlóan a másodrendű perturbációs módszer esetében is megjelenik a kétfoton-ionizációs csúcs a (8)-as egyenletnek megfelelően a $k = 1.4$ elektronimpulzus körül. Ellenben az általam használt modellben az ionizációs valószínűsége sűrűségek felülbecsülődnek. Ennek két oka van: elsősorban az elsőrendű közelítéssel ellentétben itt nem vettem figyelembe az alapállapot populációvesztését, másodsorban pedig a szórás-szórás állapotok közötti mátrixelem (lásd (42)-es összefüggés) értékékeire még nem sikerült teljesen konvergált eredményt elérnem.

4. Következtetések és kitekintés

Dolgozatomban a hidrogén atom rövid lézerimpulzus általi ionizációját tanulmányoztam az első- és másodrendű időtől függő perturbációs módszer segítségével. Az így kapott eredményeket

összehasonlítottam a TDSE-modell által szolgáltatott nagy pontosságú referenciaadatokkal.

A standard elsőrendű perturbációs modellt javítva az egyfotonos ionizáció leírásában sikerült egy nagy előrelépést tennem. Az így kapott perturbációs eredmények pontossága megegyezik a TDSE eredmények pontosságával, miközben a perturbációs modell számításigénye lényegesen kisebb.

Az elsőrendű perturbációs modell hiányossága, hogy nem tudja leírni a többfotonos ionizációt. Ezen hiányosságot küszöböltem ki a másodrendű perturbációs tag figyelembevételével. Az így kibővített modell segítségével sikerült a kétfotonos ionizáció jelenségét is leírnom.

A bemutatott perturbációs módszer tetszőlegesen tovább bővíthető (pontosítható) magasabbrendű tagok hozzáadásával. Ez nem növeli lényegesen a modellünk számításigényét, mivel a másodrendű amplitúdónál kiszámolt mátrixelemek újrahasznosíthatóak, csak az időintegrál dimenziójának növekedése növeli számottevően a magasabbrendű tagok számításigényét.

Hivatkozások

- [1] A. Baltuska *et. al*, Nature **421** 611 (2003).
- [2] C. J. Joachain *et. al* *Atoms in Intense laser fields*, Cambridge University Press (2012).
- [3] A. J. Goers *et. al*, Phys. Rev. Lett. **115**, 194802 (2015).
- [4] Zenghu Chang *Fundamentals of Attosecond Optics*, CRC Press (2011).
- [5] Jan Posthumus *Molecules and Clusters in Intense Laser Fields*, Cambridge University Press (2001).
- [6] S. Borbély *et. al*, Phys. Rev. A **87** 013405 (2013).
- [7] B. H. Bransden and C. J. Joachain *Physics of atoms and molecules*, Longman (1983).
- [8] A. Messiah *Quantum Mechanics*, North-Holland (1961).
- [9] D. A. Varshalich, N. A. Moskalev and V. K. Khersonskii *Quantum Theory of Angular Momentum*, World Scientific (1988).