

A hidrogénatom ionizációja intenzív lézertérben

Kiss Gellért Zsolt

BBTE, Fizika kar, Fizika-informatika szak

Témavezetők:

Prof. Dr. Nagy László

Egyetemi tanár, BBTE, Fizika kar, Bio- és orvosi fizika tanszék

drd. Borbély Sándor

doktorandusz, BBTE, Fizika kar, Bio- és orvosi fizika tanszék

XII. Erdélyi Tudományos Diákköri Konferencia

Kolozsvár, 2009. május 15-17.

Tartalomjegyzék

1. Bevezető	2
2. Elméleti alapok	8
3. Eredmények és tárgyalás	18
4. Következtetések	25

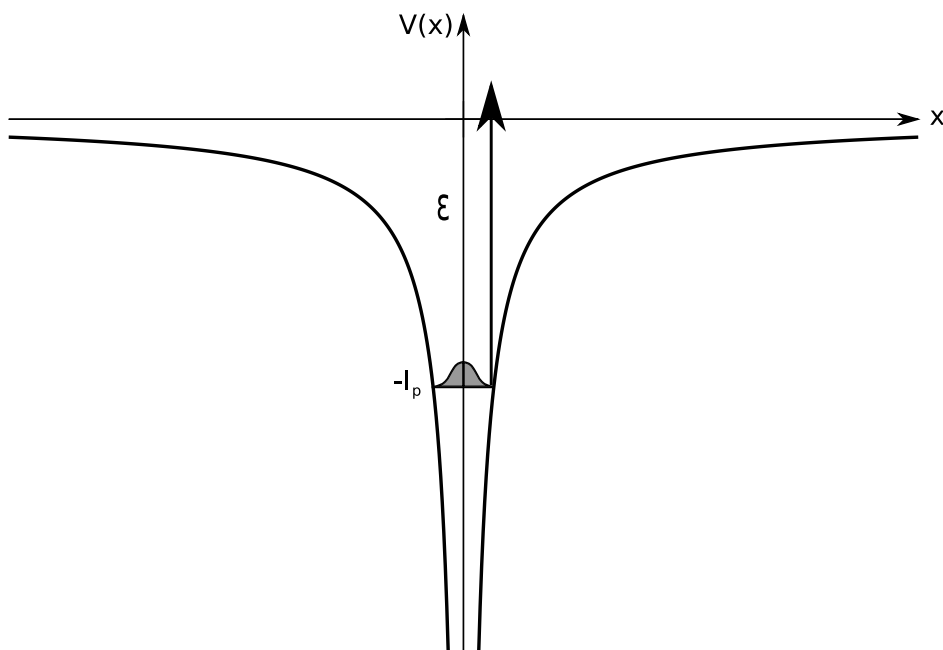
1. fejezet

Bevezető

Az utóbbi 50 évben a lézerek nagy fejlődésen mentek keresztül, és széles körben terjedtek el. A lézertechnológia rohamos fejlődését a CPA (chirped pulse amplification) módszer felfedezése indította be, mely lehetővé tette a nagyintenzitású lézerimpulzusok előállítását. A módszer 1985-ös kidolgozása előtt a nyáláb intenzitása mindössze az 1 GW/cm^2 értéket érte el [1]. Napjainkban már a világ több laboratóriumában a 10^{21} W/cm^2 intenzitást állították elő. 2008-ban a Michigan Egyetem (University of Michigan, Amerikai Egyesült Államok) kutatói előállították a $2 \times 10^{21} \text{ W/cm}^2$ intenzitású és 30 fs hosszúságú impulzust generáló, a világ eddigi legerősebb lézerét. A Herculesnek nevezett készülék akkora erősségű energiát bocsájt ki, mint ha a Napból a Föld felszínére egy adott pillanatban érkező összes fény egy homokszem nagyságú pontba lenne fókuszálva.

A kísérletekben használatos lézerek intenzitása eléri a $3 \times 10^{16} \text{ W/cm}^2$ értéket, míg az impulzusok hossza 10^{-15} s (femtoszekundum) nagyságrendű [2]. Egy 800 nm körüli hullámhosszúságú lézerimpulzus elektromos komponensének térerősségvektora ilyen rövid idő alatt mindössze néhányszor oszcillál. Ezen lézerimpulzusok és atomok (molekulák) közötti kölcsönhatás során számos, eddig ismeretlen folyamat figyelhető meg. Ezek közül kiemelhető a többfoton ionizáció (multiphoton ionization), alagút ionizáció (tunneling ionization), direkt ionizáció (direct/over-the-barrier ionization) és a felharmonikus generálása (high harmonics generation), mivel számtalan gyakorlati alkalmazásuk ismeretes. A rövid lézerimpulzusok nagy segítséget nyújtanak a gyógyításban (pl. szemlencse műtétek esetén [3]), az orvosi kutatásokban [4], a magfúzió területén [5] (pl. plazma melegítésben[6]), külön-

böző kémiai reakciók irányításában, vagy akár a modern optikai készülékek fejlesztésében.

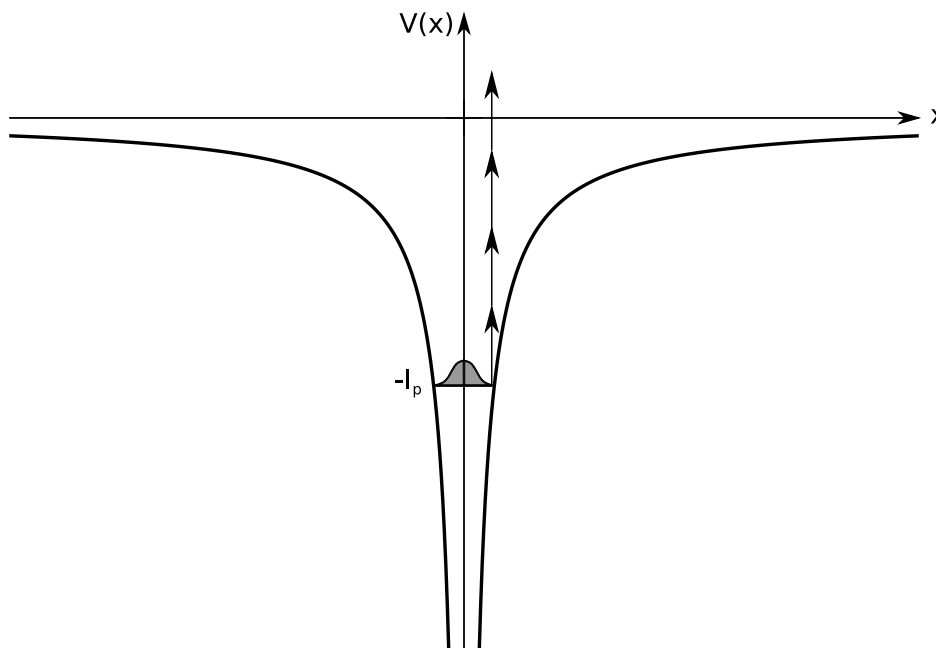


1.1. ábra. Egyfotonos ionizáció.

A lézerimpulzusok hossza femtoszekundum nagyságrendű, amely megegyezik számtalan a természetben megfigyelhető folyamat (pl. kémiai reakciók, molekulák rezgése és forgása stb.) időskálájával. Ez lehetővé teszi ezen folyamatok időbeni lefolyásának kísérleti vizsgálatát. A fenti alkalmazások tökéletesítése és más alkalmazások tervezése során nagyon fontos a lézerimpulzusok és atomok közötti kölcsönhatás során lejátszódó folyamatok pontos elméleti leírása. A szakirodalomban fellelhető elméleti modellek az időtől függő Schrödinger-egyenlet megoldásán alapulnak. Mivel az elektronra felírt Schrödinger-egyenletnek még a legegyszerűbb esetben (hidrogénatom lézertérben) sincs analitikus megoldása, két lehetőség kínálkozik. Az egyik út a Schrödinger-egyenlet közelítő megoldása egyedi esetekben, míg a második lehetőség maga az egyenlet numerikus megoldása.

Dolgozatomban a második lehetőséget követem és numerikusan oldom meg a Schrödinger-egyenletet. A programom tesztelésére a hidrogénatom ionizációjának tanulmányozását

választottam, mivel ez a szakirodalomban egy jól körüljárt és megértett problémakör [7]. A lézerimpulzusok intenzitásának függvényében különböző ionizációs típusokat különböztetünk meg.

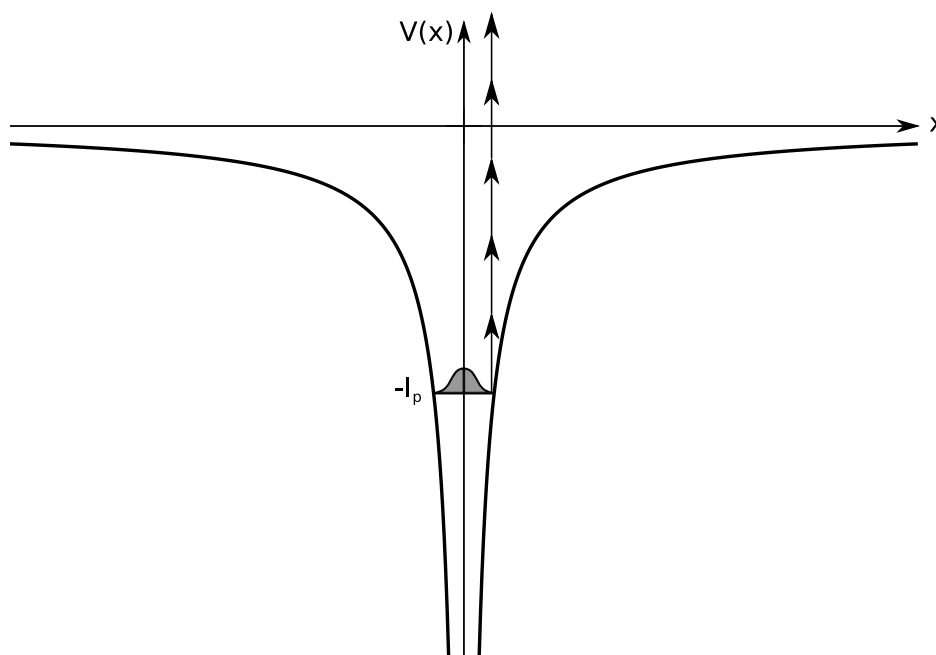


1.2. ábra. Többfotonos ionizáció.

Az **egyfotonos ionizáció** (single-photon ionization) kis intenzitású lézerimpulzusok esetén jelentkezik, amikor a lézertérben levő fotonok energiája megfelelően nagy (nagyobb vagy egyenlő mint az elektron kötési energiájának abszolút értéke) az elektronok szabaddá tételéhez (lásd 1.1. ábra). A foton energiája megadható az $\varepsilon = h\nu$ alakban, ahol h a Planck-állandó és ν a foton frekvenciája.

A **többfotonos ionizáció** (multiphoton ionization) közepes és nagy intenzitású lézerimpulzusok esetében figyelhető meg. Ebben az esetben az elektron a szabaddá válásához szükséges energiát több foton elnyelése révén szerzi meg (lásd 1.2. ábra). Ebben az esetben az ionizációs energiánál kisebb energiával rendelkező fotonok is ionizálják az elektront. Ezen folyamat feltétele a nagy intenzitás (nagy foton-sűrűség), mivel szükséges,

hogy ugyanabban a térrészben álljon az elektron rendelkezésére több foton. Abban az esetben, amikor az elektron a szükségesnél több foton nyel el, beszélünk a **küszöb feletti ionizációról** (above threshold ionization). (lásd 1.3 ábra)



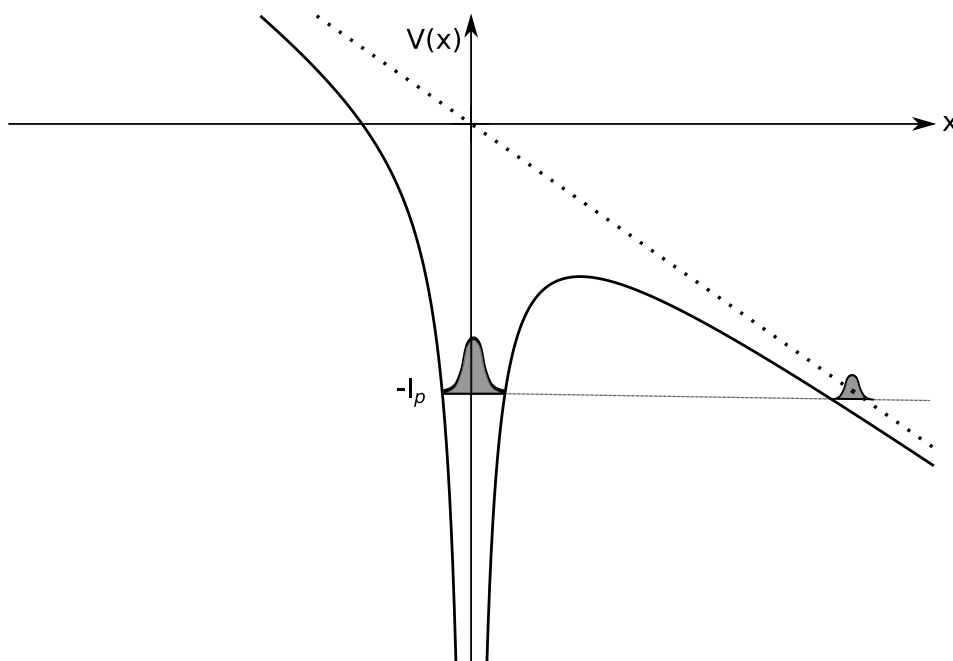
1.3. ábra. Küszöb feletti ionizáció

Alagútionizáció nagy intenzitású és kis frekvenciájú lézerterek esetén figyelhető meg. A nagy intenzitású elektromágneses tér deformálja a Coulomb potenciál alakját, mely hatásnak köszönhetően létrehoz egy potenciálgátat (1.4. ábra). Amennyiben a lézer frekvenciája megfelelően kicsi, akkor az alagúthatás révén az elektronnak ideje van eltávolodni az atommagtól. Az alagúteffektus bekövetkeztének valószínűsége gyorsan csökken a gát szélességének a növekedésével, és gyorsan növekszik ha a részecske energiájának értéke közeledik a potenciális energia értékéhez (csökken a gát magassága). Ezen érvek alapján belátható, hogy az alagút ionizáció valószínűsége nagyon érzékeny az elektromos térerősség nagyságára, és csak egy adott intenzitásküszöb felett jelentkezik. Nagy intenzitású lézerimpulzusok esetén a többfotonos és az alagútionizáció egyidejűleg van jelen. A

Keldysh által bevezetett

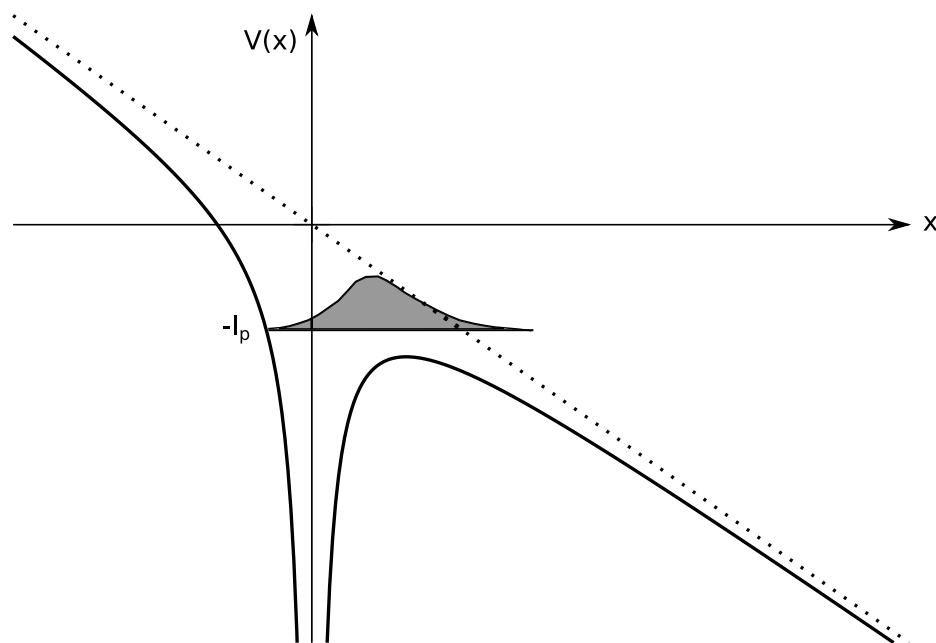
$$\gamma = \sqrt{\frac{I_p}{2U_p}} \quad (1.1)$$

paraméter határozza meg az ionizáció típusát, ahol I_p az elektron ionizációs potenciálja és $U_p = \frac{I_p}{4\omega^2}$ az elektron ponderomotív energiája (az elektron rezgési energiája elektromágneses térben). Ha $\gamma < 1$ az alagútionizáció, míg más esetben a többfotonos ionizáció tekinthető a domináns ionizációs folyamatnak.



1.4. ábra. Alagútionizáció.

Nagyon nagy lézerintenzitás estén megtörténik, hogy az alagút ionizáció során tárgyalt potenciálgát az elektron energiaszintje alá kerül, mely lehetővé teszi számára a „szabad” távozást az atommag kötéséből. Ezt az ionizációs típust nevezzük **direkt, potenciálfelüli ionizációnak** (lásd. 1.5. ábra). Számolásaim során a multi-fotonos, alagút és direkt ionizációra fektetem a hangsúlyt. A lézerimpulzusok paramétereit úgy választom, hogy a Keldysh paraméter 1 alatti értéket vegyen fel. A dolgozatomban atomi egységeket használlok



1.5. ábra. Direkt, potenciál feletti ionizáció.

- * tömegegység – elektron tömege
- * hosszúságegység – Bohr sugár
- * töltésegység – elektron töltése
- * impulzusnyomaték-egység – \hbar
- * $1/4\pi\epsilon_0 = 1$
- * energiaegység (1 Hartree) – a hidrogénatom ionizációs energiájának kétszerese

2. fejezet

Elméleti alapok

A hidrogénatom viselkedését vizsgáljuk intenzív, ultrarövid lézertér jelenlétében. A lézertér jellemző elektromágneses tér elektromos komponense a következő kifejezéssel írható le

$$\vec{E} = \begin{cases} \hat{\varepsilon} E_0 \sin(\omega t + \phi_0) \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) & \text{ha, } t \in [0, \tau], \\ 0 & \text{más esetben} \end{cases} \quad (2.1)$$

ahol $\hat{\varepsilon}$ a polarizációs egységvektor, ω a lézerhullám frekvenciája, ϕ_0 a kezdőfázis, E_0 az elektromos tér amplitudója, és τ az impulzus hossza. Annak érdekében, hogy a lézerimpulzus időben szimmetrikus legyen, a kezdőfázisnak a

$$\phi_0 = -\frac{\omega\tau}{2} - \frac{\pi}{2} \quad (2.2)$$

értéket választjuk. Az aktív elektróra dipól közelítésben felírt időtől függő Schrödinger-egyenlet

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2} + \vec{r} \cdot \vec{E} + V(\vec{r}) \right) \Psi(t), \quad (2.3)$$

ahol a $\Psi(t)$ az elektront leíró hullámfüggvény, a $V(\vec{r})$ az atommag Coulomb-potenciálja, míg az $\vec{r} \cdot \vec{E}$ szorzat a lézertér és az elektron közötti kölcsönhatási potenciál.

Az elektron hullámfüggvénye megadható, mint

$$\Psi(t) = \int c(\vec{k}, t) \Psi_V(\vec{k}, t) d\vec{k}, \quad (2.4)$$

ahol $\Psi_V(\vec{k}, t)$ Volkov hullámfüggvényeket használjuk bázisként. A fenti sorfejtésben szereplő $c(\vec{k}, t)$ együtthatók egyenértékűek a $\Psi(t)$ hullámfüggvénnyel. A Volkov-hullámfüggvények

az elektromágneses térben levő elektromosan töltött részecskére dipól közelítésben felírt időtől függő Schrödinger-egyenlet megoldásai. Az időtől függő Schrödinger-egyenlet felírható úgy, mint

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_V(\vec{k}, t) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2} + \vec{r} \cdot \vec{E} \right) \Psi_V(\vec{k}, t). \quad (2.5)$$

A (2.5) Schrödinger-egyenlet megoldása

$$\Psi_V(\vec{k}, t) = e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{k} + \vec{A}(t')]^2} e^{i[\vec{k} + \vec{A}(t)] \cdot \vec{r}}, \quad (2.6)$$

kifejezéssel adható meg, ahol

$$\vec{A}(t) = - \int_0^t \vec{E}(t') dt'$$

az elektromágneses tér vektorpotenciálja.

A (2.4) hullámfüggvényt behelyettesítve az aktív elektronra felírt Schrödinger-egyenletbe, kapjuk:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \int d\vec{k} c(\vec{k}, t) \Psi_V(\vec{k}, t) = \left(\frac{\hat{p}^2}{2} + \vec{r} \cdot \vec{E} + V(\vec{r}) \right) \int d\vec{k} c(\vec{k}, t) \Psi_V(\vec{k}, t). \quad (2.7)$$

Behelyettesítve a Volkov-hullámfüggvények (2.6) alakját, az

$$\begin{aligned} & i \frac{\partial}{\partial t} \int d\vec{k} c(\vec{k}, t) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{k} + \vec{A}(t')]^2} e^{i[\vec{k} + \vec{A}(t)] \cdot \vec{r}} = \\ & = \left(\frac{\hat{p}^2}{2} + \vec{r} \cdot \vec{E} + V(\vec{r}) \right) \int d\vec{k} c(\vec{k}, t) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{k} + \vec{A}(t')]^2} e^{i[\vec{k} + \vec{A}(t)] \cdot \vec{r}} \end{aligned}$$

egyenlethez jutunk.

A (2.7)-ben elvégezve az idő szerinti parciális deriválást

$$\begin{aligned} & i \int d\vec{k} \Psi_V(\vec{k}, t) \frac{\partial}{\partial t} c(\vec{k}, t) + i \int d\vec{k} c(\vec{k}, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi_V(\vec{k}, t) = \\ & = \left(\frac{\hat{p}^2}{2} + \vec{r} \cdot \vec{E} \right) \int d\vec{k} c(\vec{k}, t) \Psi_V(\vec{k}, t) + \int d\vec{k} c(\vec{k}, t) V(\vec{r}) \Psi_V(\vec{k}, t) = \\ & = \int d\vec{k} c(\vec{k}, t) \left(\frac{\hat{p}^2}{2} + \vec{r} \cdot \vec{E} \right) \Psi_V(\vec{k}, t) + \int d\vec{k} c(\vec{k}, t) V(\vec{r}) \Psi_V(\vec{k}, t) \end{aligned}$$

majd alkalmazva a Volkov függvényekre felírt (2.5) egyenletet kapjuk, hogy

$$i \int d\vec{k} \Psi_V(\vec{k}, t) \frac{\partial}{\partial t} c(\vec{k}, t) = \int d\vec{k} c(\vec{k}, t) V(\vec{r}) \Psi_V(\vec{k}, t).$$

Az egyenlet mindkét oldalát beszorozva $e^{-i\vec{p}_q\vec{r}}$ -el, majd integrálva $d\vec{r}$ szerint, az

$$\begin{aligned} i \int d\vec{k} \left[\frac{\partial}{\partial t} c(\vec{k}, t) \right] e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{k} + \vec{A}(t')]^2} \int d\vec{r} e^{i[\vec{k} - \vec{p}_q + \vec{A}(t)] \vec{r}} = \\ = \int d\vec{k} [c(\vec{k}, t) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{k} + \vec{A}(t')]^2} \int d\vec{r} V(\vec{r}) e^{i[\vec{k} - \vec{p}_q + \vec{A}(t)] \vec{r}}]. \end{aligned}$$

kifejezéshez jutunk.

Felhasználva a Dirac-delta $\int d\vec{r} e^{i\vec{x}\vec{r}} = (2\pi)^3 \delta(\vec{x})$ tulajdonságát, azaz

$$\int d\vec{r} e^{i[\vec{k} - \vec{p}_q + \vec{A}(t)] \vec{r}} = (2\pi)^3 \delta[\vec{k} + \vec{A}(t) - \vec{p}_q]$$

kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} i(2\pi)^3 \int d\vec{k} \left(\frac{\partial}{\partial t} c(\vec{k}, t) \right) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{k} + \vec{A}(t')]^2} \delta[\vec{k} + \vec{A}(t) - \vec{p}_q] \equiv \\ \equiv i(2\pi)^3 e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{p} - \vec{A}(t) + \vec{A}(t')]^2} \frac{\partial}{\partial t} c(\vec{p}_q - \vec{A}(t)) = \\ = \int d\vec{k} c(\vec{k}, t) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{k} + \vec{A}(t')]^2} \int d\vec{r} V(\vec{r}) e^{i[\vec{k} - \vec{p}_q + \vec{A}(t)] \vec{r}}. \end{aligned}$$

Elvégezve $\vec{q} = \vec{p}_q - \vec{A}(t)$, $\vec{s} = \vec{k} - \vec{p}_q + \vec{A}(t)$, $d\vec{s} = d\vec{k}$ a változócsereket, a fenti egyenlet a következő alakot veszi fel:

$$\begin{aligned} i(2\pi)^3 e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{q} + \vec{A}(t')]^2} \frac{\partial}{\partial t} c(\vec{q}, t) = \\ = \int d\vec{s} c(\vec{s} + \vec{q}; t) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{s} + \vec{q} + \vec{A}(t')]^2} \int d\vec{r} V(\vec{r}) e^{i\vec{s}\vec{r}}. \end{aligned}$$

A fenti egyenletet átrendezve a $c(\vec{q}; t)$ együtthatók idő szerinti deriváltjára a következő kifejezést kapjuk:

$$\frac{\partial}{\partial t} c(\vec{q}; t) = -\frac{i}{(2\pi)^3} \int d\vec{s} c(\vec{s} + \vec{q}; t) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [(\vec{s} + \vec{q} + \vec{A}(t'))^2 - (\vec{q} + \vec{A}(t'))^2]} \int d\vec{r} V(\vec{r}) e^{i\vec{s}\vec{r}},$$

ahol az aláhuzott kifejezést egyszerűbb alakra hozzuk $\vec{s}^2 + 2\vec{s}[\vec{q} + \vec{A}(t')]$.

$$\frac{\partial}{\partial t} c(\vec{q}; t) = -\frac{i}{(2\pi)^3} \int d\vec{s} c(\vec{s} + \vec{q}; t) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{s}^2 + 2\vec{s}[\vec{q} + \vec{A}(t')]]} \int d\vec{r} V(\vec{r}) e^{i\vec{s}\vec{r}}$$

Legyen $\vec{p} = \vec{s} + \vec{q}$; $\vec{s} = \vec{p} - \vec{q}$ és $d\vec{p} = d\vec{s}$

Az egyenletet tovább alakítva kapjuk, hogy

$$\frac{\partial}{\partial t} c(\vec{q}; t) = -\frac{i}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} c(\vec{p}; t) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [(\vec{p} - \vec{q})(\vec{p} - \vec{q} + 2\vec{q} + 2\vec{A}(t'))]} \int d\vec{r} V(\vec{r}) e^{i(\vec{p} - \vec{q}) \vec{r}}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} c(\vec{q}; t) = -\frac{i}{(2\pi)^3} \int d\vec{p} c(\vec{p}; t) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [p^2 - q^2 + 2\vec{p}\vec{A}(t') - 2\vec{q}\vec{A}(t')]} \int d\vec{r} V(\vec{r}) e^{i(\vec{p}-\vec{q})\vec{r}}.$$

A \vec{p} -től független tagok kihozhatók az integrál elé. Így írható, hogy

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} c(\vec{q}; t) &= -\frac{i}{(2\pi)^3} e^{\frac{i}{2} \int_0^t dt' [q^2 + 2\vec{q}\vec{A}(t')]} \times \\ &\times \int d\vec{p} c(\vec{p}; t) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [p^2 + 2\vec{p}\vec{A}(t')]} \int d\vec{r} V(\vec{r}) e^{i(\vec{p}-\vec{q})\vec{r}}. \end{aligned}$$

Bevezetve az $\vec{F}(t) = \int_0^t \vec{A}(t') dt'$, vagyis $\vec{F}(t) = \int_0^t dt' [-\int_0^{t'} \vec{E}(t'') dt'']$ függvényt, a $c(\vec{p}; t)$ együtthatókra a következő egyenletet kapjuk:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} c(\vec{q}; t) &= -\frac{i}{(2\pi)^3} e^{\frac{i}{2} [q^2 t + 2\vec{q}\vec{F}(t)]} \times \\ &\times \int d\vec{p} c(\vec{p}; t) e^{-\frac{i}{2} [p^2 t + 2\vec{p}\vec{F}(t)]} \int d\vec{r} V(\vec{r}) e^{i(\vec{p}-\vec{q})\vec{r}}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

A fenti kifejezésben szereplő $V(\vec{r})$ az elektron és az atommag közötti Coulomb-potenciál, amely hidrogénatom esetén gömbszimmetrikus, és megadható mint $V(\vec{r}) \equiv V(r) = -\frac{1}{r}$.

Legyen

$$I(\vec{s}) = \int d\vec{r} V(\vec{r}) e^{i\vec{s}\vec{r}},$$

vagyis

$$I(\vec{s}) = - \int d\vec{r} \frac{1}{r} e^{i\vec{s}\vec{r}}, \quad \text{ahol, } \vec{s} = \vec{p} - \vec{q};$$

a Coulomb-potenciál Fourier-transzformáltja.

A fenti egyenlet legegyszerűbben polárkoordináta-rendszerben számolható ki.

Így:

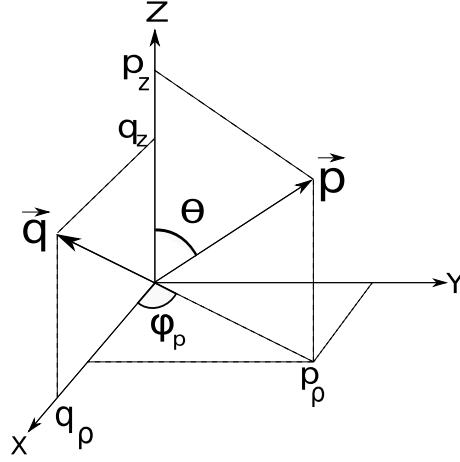
$$d\vec{r} = r^2 \sin(\theta) d\theta d\varphi dr,$$

és

$$I(\vec{s}) = - \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \int_{-\infty}^\infty dr \frac{r^2}{r} \sin \theta e^{i s r \cos \theta}.$$

Az integrál analitikus kiszámolása után kapjuk, hogy

$$I(\vec{s}) = -\frac{4\pi}{s^2}, \quad \text{ahol } s^2 = (\vec{p} - \vec{q})^2.$$



2.1. ábra. Hengerkoordináták a térben.

A Coulomb potenciál Fourier-transzformáltját behelyettesítve a 2.8 egyenletbe a következő kifejezéshez jutunk:

$$\frac{\partial}{\partial t} c(\vec{q}; t) = -\frac{i}{(2\pi)^3} e^{\frac{i}{2}[q^2 t + 2\vec{q} \cdot \vec{F}(t)]} \int d\vec{p} c(\vec{p}; t) e^{-\frac{i}{2}[p^2 t + 2\vec{p} \cdot \vec{F}(t)]} \left(-\frac{4\pi}{(\vec{p} - \vec{q})^2} \right). \quad (2.9)$$

Mivel a Coulomb-potenciál gömbszimmetrikus, és a lézertér lineárisan polarizált a Schrödinger-egyenlet és az ezzel egyenértékű (2.9) fenti egyenlet hengersizmetrikus, ezért előnyös a hengerkoordináták használata (2.1. ábra). A fenti 2.1 ábra értelmében $p_x = p_\rho \cos \varphi_p$, $p_y = p_\rho \sin \varphi_p$, és $p_z = p_z$. Az előbbi összefüggéseket alkalmazva, következik hogy:

$$\vec{p} \cdot \vec{F}(t) = p_z F(t),$$

$$p^2 = p_z^2 + p_\rho^2.$$

A \vec{q} koordinátáira kapjuk, hogy $q_x = q_\rho$, $q_y = 0$, és $q_z = q_z$.

Az új koordináták (hengerkoordináták) segítségével a 2.8 egyenlet a következő alakban írható:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} c(q_\rho, q_z; t) &= -\frac{i}{(2\pi)^3} e^{\frac{i}{2}[(q_\rho^2 + q_z^2)t + 2p_z F(t)]} \times \\ &\times \int dp_z \int dp_\rho p_\rho \int_0^{2\pi} d\varphi_p c(p_\rho, p_z; t) \times \\ &\times e^{-\frac{i}{2}[(p_\rho^2 + p_z^2)t + 2p_z F(t)]} \frac{-4\pi}{p_\rho^2 + p_z^2 + q_\rho^2 + q_z^2 - 2q_z p_z - 2p_\rho q_\rho \cos \varphi_p}, \end{aligned}$$

ahol felhasználtuk, hogy $(\vec{p} - \vec{q})^2 = p_\rho^2 + p_z^2 + q_\rho^2 + q_z^2 - 2p_z q_z - 2q_\rho p_\rho \cos \varphi_p$.

A φ_p szerinti integrál analitikusan elvégezhető:

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} d\varphi_p \frac{-4\pi}{p_\rho^2 + p_z^2 + q_\rho^2 + q_z^2 - 2q_z p_z - 2q_\rho p_\rho \cos \varphi_p} = \\ & = \frac{-8\pi^2}{[(p_\rho - q_\rho)^2 + (p_z - q_z)^2]^{1/2} [(p_\rho + q_\rho)^2 + (p_z - q_z)^2]^{1/2}}. \end{aligned}$$

A fenti integrál kifejezését felhasználva a sorfejtési együtthatókra a következő integro-differenciál-egyenlethez jutunk:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} c(q_\rho, q_z; t) &= \frac{i}{\pi} e^{\frac{i}{2}[(q_\rho^2 + q_z^2)t + 2q_z F_2(t)]} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \int_0^{\infty} dp_\rho c(p_z, q_z; t) \times \\ & \times \frac{p_\rho e^{-\frac{i}{2}[(p_\rho^2 + p_z^2)t + 2p_z F_2(t)]}}{[(p_\rho - q_\rho)^2 + (p_z - q_z)^2]^{1/2} [(p_\rho + q_\rho)^2 + (p_z - q_z)^2]^{1/2}}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

ahol

$$F_2(t) = \int_0^t dt' \vec{A}(t')^2$$

A fenti (2.10) egyenlet teljes mértékben egyenértékű a (2.3) Schrödinger-egyenlettel. Amennyiben ismertek a $c(\vec{k}, t)$ együtthatók, akkor a tanulmányozott rendszer időbeli fejlődése ismertnek tekinthető.

A következőkben vizsgáljuk meg azt, hogy hogyan számítható ki egy adott kötött állapot (tövébbiakban k.á.) betöltöttségi valószínűsége. Az elektronra felírt hullámfüggvény a (2.4) alakban adható meg, specifikus esetben a k.á.-nak megfelelő hullámfüggvény pedig:

$$\Psi_b = \int d\vec{k} c_b(\vec{k}; t) \Psi_V(\vec{k}; t), \quad (2.11)$$

ahol Ψ_b a k.á. hullámfüggvénye, míg $c_b(\vec{k}; t)$ a hozzá tartozó sorfejtési együtthatók. Az adott k.á. betöltöttségi valószínűsége egy adott t időpillanatban $P_b = |\langle \Psi_b | \Psi(\vec{r}; t) \rangle|^2$. A $\langle \Psi_b | \Psi(\vec{r}; t) \rangle$ skaláris szorzat felírható a sorfejtési együtthatók függvényében.

Felhasználva a (2.11) és (2.4) egyenleteket,

$$\langle \Psi_b | \Psi(\vec{r}; t) \rangle = \int d\vec{r} \left[\int d\vec{k}' c_b^*(\vec{k}'; t) \Psi_V^*(\vec{k}'; t) \right] \left[\int d\vec{k} c(\vec{k}; t) \Psi_V(\vec{k}; t) \right].$$

A Volkov függvények (2.6) alakját behelyettesítve, majd felcserélve az integrálás sorrendjét kapjuk a

$$\begin{aligned} \langle \Psi_b | \Psi(\vec{r}; t) \rangle &= \int d\vec{k}' c_b^*(\vec{k}'; t) e^{+\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{k}' + \vec{A}(t')]^2} \int d\vec{k} c(\vec{k}; t) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{k} + \vec{A}(t')]^2} \times \\ &\times \int d\vec{r} e^{-i[\vec{k}' - \vec{k}]\vec{r}}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

összefüggést.

A fenti (2.12) összefüggésben az $\int d\vec{r} e^{-i[\vec{k}' - \vec{k}]\vec{r}} = (2\pi)^3 \delta(\vec{k}' - \vec{k})$.

Tehát:

$$\langle \Psi_b | \Psi(\vec{r}; t) \rangle = (2\pi)^3 \int d\vec{k}' c_b^*(\vec{k}'; t) \int d\vec{k} c(\vec{k}; t) \delta(\vec{k}' - \vec{k}).$$

Felhasználva a Dirac-delta azon tulajdonságát, hogy

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - \alpha) f(x) dx = f(\alpha)$$

és k' helyett k -t írva kapjuk:

$$\langle \Psi_b | \Psi(\vec{r}; t) \rangle = (2\pi)^3 \int d\vec{k} c_b^*(\vec{k}; t) c(\vec{k}; t). \quad (2.13)$$

A legalacsonyabb energiával rendelkező k.á.-ra, az $1s$ alapállapotra felírva a fenti egyenlőséget kapjuk:

$$\langle \Psi_{1s} | \Psi(\vec{r}; t) \rangle = (2\pi)^3 \int d\vec{k} c_{1s}^*(\vec{k}; t) c(\vec{k}; t). \quad (2.14)$$

Az $1s$ állapot hullámfüggvénye :

$$\Psi_{1s}(\vec{r}) \equiv \Psi_{1s}(r) = \frac{1}{\pi^{1/2}} e^{-r}. \quad (2.15)$$

Felhasználva a (2.6) és (2.15) összefüggéseket, írható, hogy:

$$\frac{1}{\pi^{1/2}} e^{-r} = \int d\vec{k} c_{1s}(\vec{k}; t) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{k} + \vec{A}(t')]^2} e^{i[\vec{k} + \vec{A}(t)]\vec{r}}$$

A fenti egyenlet mindkét oldalát beszorozva $e^{-i\vec{p}\vec{r}}$ -el és $d\vec{r}$ szerint integrálva:

$$\begin{aligned} \int d\vec{r} \frac{e^{-r}}{\pi^{1/2}} e^{-i\vec{p}\vec{r}} &= \int d\vec{k} c_{1s}(\vec{k}; t) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{k} + \vec{A}(t')]^2} \int d\vec{r} e^{i[\vec{k} + \vec{A}(t) - \vec{p}]\vec{r}} = \\ &= (2\pi)^3 \int d\vec{k} c_{1s}(\vec{k}; t) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{k} + \vec{A}(t')]^2} \delta(\vec{k} + \vec{A}(t) - \vec{p}) \end{aligned}$$

$$\int d\vec{r} \frac{e^{-r}}{\pi^{1/2}} e^{-i\vec{p}\vec{r}} = (2\pi)^3 c_{1s}(\vec{p} - \vec{A}(t)) e^{-\frac{i}{2} \int_0^t dt' [\vec{p} - \vec{A}(t) + \vec{A}(t')]^2} \quad (2.16)$$

Az egyenlet bal oldalára felírható:

$$\int d\vec{r} \frac{e^{-r}}{\pi^{1/2}} e^{-i\vec{p}\vec{r}} = \frac{1}{\pi^{1/2}} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty dr r^2 \sin\theta e^{-r} e^{-pr \cos\theta} \quad (2.17)$$

A (2.17) egyenletet analitikusan megoldva kapjuk, hogy:

$$\int d\vec{r} \frac{e^{-r}}{\pi^{1/2}} e^{-i\vec{p}\vec{r}} = \frac{8\pi}{\left[(\vec{q} + \vec{A}(t))^2 + 1 \right]^2} \quad (2.18)$$

A (2.16) és (2.18) értelmében:

$$c_{1s}(q_\rho, q_z; t) = \frac{1}{\pi^{5/2}} \frac{\exp\left\{ \frac{i}{2} [(q_\rho^2 + q_z^2)t + 2q_z \int_0^t A(t') dt' + \int_0^t A^2(t') dt'] \right\}}{\left[q_\rho^2 + q_z^2 + 2q_z A(t) + A^2(t) + 1 \right]^2}$$

Megfigyelhető, hogy $t = 0$ időpillanatban a fenti kifejezésből visszacapjuk a alapállapot $c_{1s}(\vec{q}; t = 0)$ együttható alakját

$$c_{1s}(\vec{q}; t = 0) = \frac{1}{\pi^{5/2} (q^2 + 1)^2}, \quad (2.19)$$

amely kezdeti értéként fog szolgálni a (2.10) egyenlet megoldása során.

Magasabb energiájú kötött állapotok esetén a $c_b(\vec{q}, t)$ sorfejtési együtthatók az alábbi gondolatmenetet követve számoljuk. Amennyiben ezekkel az együtthatókkal már rendelkezünk, az adott állapot hullámfüggvényét ismertnek tekintjük. A kötött állapot és az időben propagált hullámfüggvény ismeretében a különböző k.á.-ok betöltöttségi valószínűségét vizsgálhatjuk a 2.13 összefüggés felhasználásával.

Egy adott k.á. időtől függő hullámfüggvénye felírható úgy, mint

$$\Psi_b(\vec{r}, t) = \psi_b e^{-iE_b t}, \quad (2.20)$$

ahol E_b a k.á. energiája, míg a $\psi_b(\vec{r})$ a k.á. időtől független hullámfüggvénye. A Ψ_b felírható a Volkov függvények lineáris kombinációjaként:

$$\begin{aligned} \Psi_b(\vec{r}, t) &= \int d\vec{k} c_b(\vec{k}, t) \Psi_V(\vec{k}, \vec{r}; t) = \\ &= \int d\vec{k} c_b(\vec{k}; t) e^{-\frac{i}{2} (k^2 t + 2\vec{k}\vec{F}(t) + F_2(t))\vec{r}}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\int d\vec{r} \Psi_b(\vec{r}, t) e^{-i\vec{p}\vec{r}} = \int d\vec{k} c_b(\vec{k}, t) e^{-\frac{i}{2}(k^2 t + 2\vec{k}\vec{F}(t) + F_2(t))} \int d\vec{r} e^{i(\vec{k} + \vec{A}(t) - \vec{p})\vec{r}} \quad (2.22)$$

$$\int d\vec{r} \Psi_b(\vec{r}, t) e^{-i\vec{p}\vec{r}} = \int d\vec{k} c_b(\vec{k}, t) e^{-\frac{i}{2}(k^2 t + 2\vec{k}\vec{F}(t) + F_2(t))} \delta(\vec{k} + \vec{A}(t) - \vec{p}) \quad (2.23)$$

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r} \Psi_b(\vec{r}, t) e^{-i\vec{p}\vec{r}} = c_b(\vec{p} - \vec{A}(t); t) e^{-\frac{i}{2}[(\vec{p} - \vec{A}(t))^2 t + 2(\vec{p} - \vec{A}(t))\vec{F}(t) + F_2(t)]}. \quad (2.24)$$

A változócsereát alkalmazva:

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r} \Psi_b(\vec{r}, t) e^{-i(\vec{q} + \vec{A}(t))\vec{r}} = c_b(\vec{q}; t) e^{-\frac{i}{2}(\vec{q}^2 t + 2\vec{q}\vec{F}(t) + F_2(t))} \quad (2.25)$$

A fenti (2.25) egyenletből a $c_b(\vec{k}; t)$ együtthatókat kifejezve, majd ebbe behelyettesítve az időfüggő hullámegyenlet (2.20) alakját, kapjuk a következő kifejezést:

$$c_b(\vec{q}; t) = e^{\frac{i}{2}(\vec{q}^2 t + 2\vec{q}\vec{F}(t) + F_2(t))} e^{-E_b t} \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r} \psi_b(\vec{r}) e^{-i(\vec{q} + \vec{A}(t))\vec{r}}. \quad (2.26)$$

Tehát

$$c_b(\vec{q}; t) = e^{\frac{i}{2}(\vec{q}^2 t + 2\vec{q}\vec{F}(t) + F_2(t))} e^{-E_b t} c_b^0(\vec{q} + \vec{A}(t)), \quad (2.27)$$

ahol a

$$c_b^0(\vec{q}) \equiv c_b(\vec{q}; t = 0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r} \psi_b(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}}. \quad (2.28)$$

együtthatók a b -vel jelölt kötött állapot sorfejtési együtthatói a lézertér bekapcsolása előtti időpillanatban. A $c_b^0(\vec{q})$ a $\Psi_b(\vec{r})$ hullámfüggvény impulzustérben, és az értékei a (2.28) egyenletben levő integrál numerikus megoldásával adhatók meg.

A gyakorlati alkalmazások szempontjából fontos az ionizáció során szabaddá vált elektronok impulzuseloszlásának meghatározása. Egy \vec{k} impulzusú szabad elektron leírására a

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (2.29)$$

síkhullámot használjuk. A fenti síkhullámot az egzakt Coulomb hullámfüggvény helyett használjuk a számolások egyszerűsítése végett. Annak a valószínűsége, hogy a elektron az alapállapotból a \vec{k} impulzusú végállapotba jusson megadható, mint

$$P_{i \rightarrow f} = |\langle \Psi(t) | \psi_{\vec{k}}(r) \rangle|^2 = (2\pi)^3 |c(\vec{k} - \vec{A}(t); t)|^2, \quad (2.30)$$

ahol a $c(\vec{k} - \vec{A}(\tau), \tau)$ együtthatókat a (2.10) egyenlet megoldásaként kapjuk meg.

A (2.10) egyenlet egzakt analitikus megoldása nem ismert. Nagyon nagy intenzitású lézertimpulzusok esetén az elektron és a lézertér közötti kölcsönhatási potenciál jóval nagyobb lehet, mint az elektron és az atommag közötti Coulomb potenciál. Ebben az esetben a (2.3) Schrödinger egyenletben a $V(\vec{r})$ potenciál elhanyagolható, ezért a (2.10) egyenlet leegyszerűsödik:

$$\frac{\partial}{\partial t} c(\vec{q}; t) = 0. \quad (2.31)$$

A fenti közelítő egyenlet analitikusan megoldható, és a kapott eredmény a szakirodalomban Volkov-modellként ismert [7].

$$c(\vec{q}; t) = c(\vec{q}; t = 0) = c_{1s}(\vec{q}, t = 0), \quad (2.32)$$

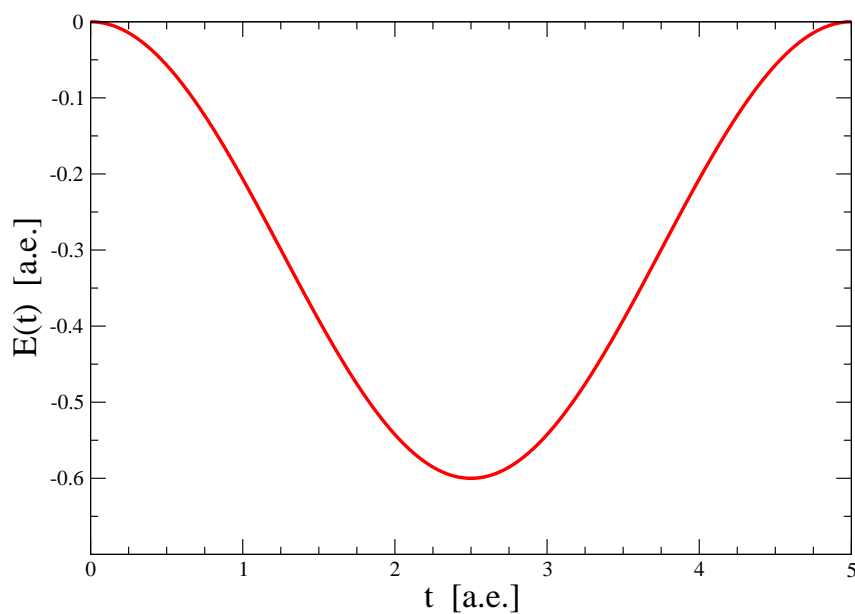
ahol felhasználtuk a (2.19) kezdetiérték feltételt. A fenti közelítő megoldás csak nagy intenzitások esetén szolgáltat pontos eredményeket.

Pontosabb eredmények kaphatók a (2.10) egyenletet numerikus megoldása során, aminek egyetlen hátránya, hogy nagyon nagy számítási és tárolási kapacitást igényel. A numerikus számítások egyik legkritikusabb eleme a numerikus rács kiválasztása, amelyen a megoldandó egyenletet diszkretizáljuk. A programomban egyenlő közű rácsot használok, amelyben a rácspontok közötti távolság $\Delta q_z = \Delta q_r = 0.05$ atomi egység. A rácspontok távolságát az alapállapot hullámfüggvény és a lézertimpulzus paraméterei határozzák meg. A használt rács kellően sűrű kell legyen ahhoz, hogy az alapállapot hullámfüggvény pontosan megadható legyen, valamint a rácspontok közötti távolságnak legalább egy nagyságrenddel kisebbnek kell lennie, mint az elektron impulzusváltozása az egy foton elnyelése során. Esetünkben ($\tau < 2\pi/\omega$, $\tau = 5$ atomi egység) a tipikus impulzusváltozás egységnyi, ezért a kiválasztott $\Delta q_{z,r} = 0.05$ rácsponttávolság indokolt. A (2.10) egyenletben szereplő integrálok számítása során Simpson-módszert használok. A $c(\vec{q}; t)$ sorfejtési együtthatókat a (2.10) egyenlet alapján propagálom negyedrendű Runge-Kutta módszert használva. A propagálás során az időlépés $\Delta t = 0.005$ atomi egység. Az időlépés nagyságát úgy választom meg, hogy a propagálás során a Runge-Kutta módszer segítségével becsült relatív hiba értéke kisebb legyen, mint 10^{-6} .

3. fejezet

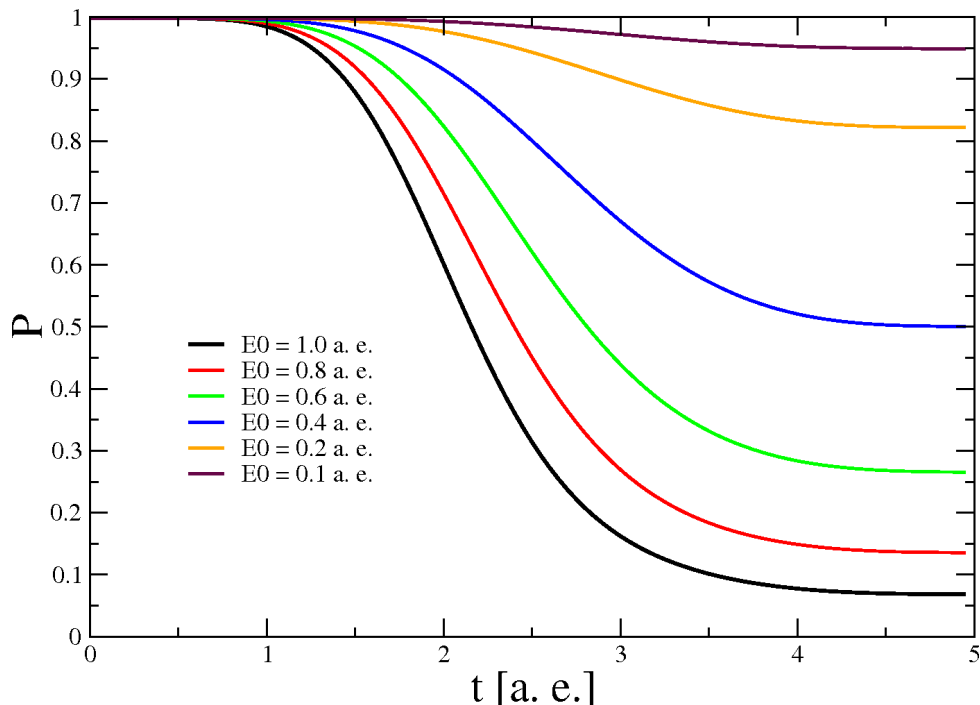
Eredmények és tárgyalás

A vizsgálataim megkezdése előtt a lézerimpulzus hosszát és frekvenciáját lerögzítettem : $\omega = 0.05$, $\tau = 5$. A hidrogénatomra felírt (2.3) egyenletet numerikusan megoldottam különböző maximalis intenzitású, és a fent rögzített paraméterekkel rendelkező lézerimpulzusokra. A lézertér elektromos komponensének amplitudója a következő értékeket veszi fel: $E_0 \in \{ \dots \}$ akja a



3.1. ábra. A lézertér elektromos komponense az idő függvényében. A lézertér paraméterei: $\omega = 0.05$ a.e., $E_0 = 0.6$ a.e., $\tau = 5$ a.e.

3.1. ábrán látható.

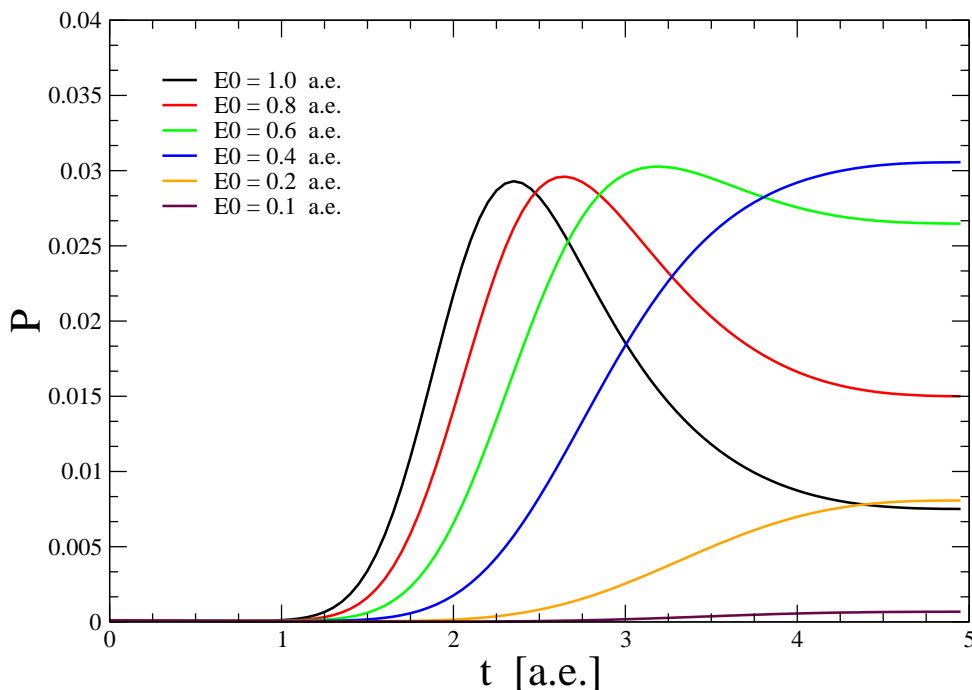


3.2. ábra. 1s alapállapot betöltöttségi valószínűsége az idő függvényében különböző intenzitású lézerimpulzusok esetén.

A 3.2. ábrán látható az 1s alapállapot betöltöttségi valószínűsége az idő függvényében, különböző intenzitású lézerimpulzusokra. Megfigyelhető, hogy nagy intenzitás esetén ($E_0 = 1$ atomi egység = 3.5×10^{16} W/cm²) az elektronok nagy valószínűséggel ionizálódnak (gyakorlatilag az alapállapot kiürül), míg kis intenzitás esetén ($E_0 = 0.1$ atomi egység = 3.5×10^{14} W/cm²) az elektron nagy valószínűséggel az alapállapotban található a lézerimpulzus végén is. A 3.2 ábrán az is megfigyelhető, hogy a betöltöttségi valószínűségek változása az elektromos tér maximumának környékén lényeges, ami alagút és direkt ionizációs mechanizmus jelenlétére utal.

A továbbiakban vizsgáljuk meg a 2s és 2p állapotok telítettségi fokát, amelyek a 3.3 és 3.4 ábrákon láthatók. Mindkét ábrán megfigyelhető, hogy nagy intenzitás esetén ($E_0 = 1, 0.8, 0.6$) az állapotok telítettsége egy maximális érték után elkezdi csökkenni. Ez azzal magyarázható, hogy egy adott idő után az 1s állapot nagymértékben kiürül, ezáltal megszűnik a forrás. Ez a tendencia nem figyelhető meg kisebb intenzitásoknál ($E_0 =$

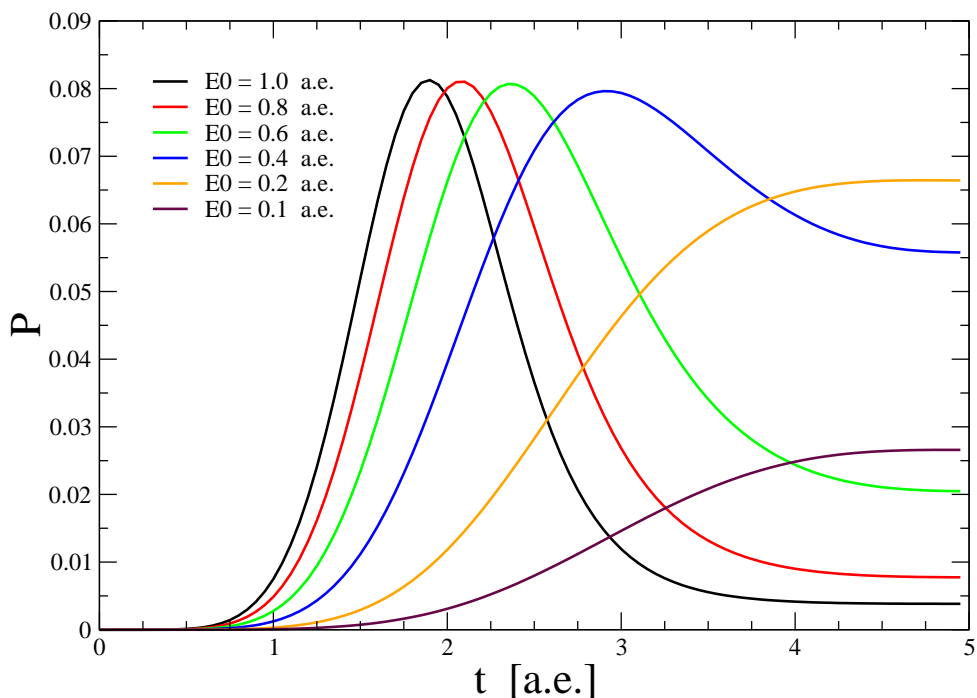
0.2, 0.1



3.3. ábra. $2s$ állapot betöltöttségi valószínűsége az idő függvényében különböző intenzitású lézertimpulzusok esetén.

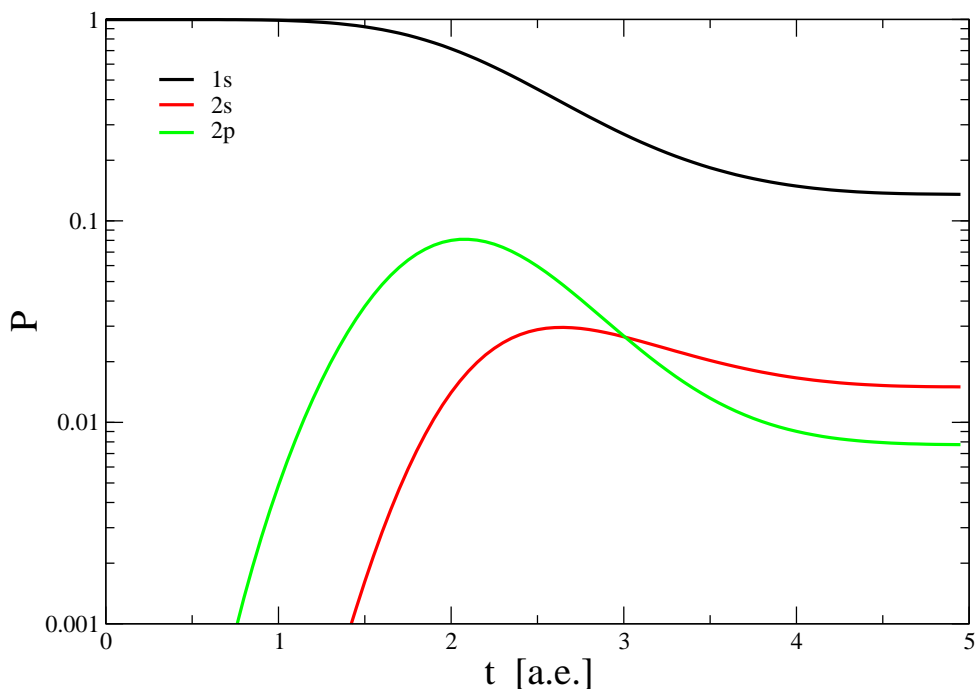
vonhatók le összehasonlítva az $1s$, $2s$, $2p$ állapotok telítettségének időbeli változását egy adott intenzitásra (lásd 3.5 ábra). Megfigyelhető, hogy a $2p$ állapot telítettsége jóval hamarabb kezd el növekedni mint a $2s$ állapot telítettségé. Ez a viselkedés egyszerűen magyarázható a fotonátmenetekre érvényes kiválasztási szabályokkal. Az $1s \rightarrow 2s$ átmenet során az elektronnak páros számú fotont (minimum kettőt), míg az $1s \rightarrow 2p$ átmenet során páratlan számú (minimum egy) fotont kell elnyelnie. Az $1s \rightarrow 2p$ elektronátmenet feltétele (minimum 1 megfelelő energiájú foton) kisebb térerősség (fotonsűrűség) esetén valósul meg mint az $1s \rightarrow 2s$ elektronátmenet feltétele (minimum 2 megfelelő energiájú foton) csak nagy térerősség esetén valósul meg. Ezt a következtetést támasztja alá az a megfigyelés, hogy kis intenzitás esetén ($E_0 = 0.1$) a lézertér után a $2s$ állapot telítettsége elhanyagolhatóan kicsi ($< 0.1\%$), míg a $2p$ állapoté lényeges ($\approx 2.5\%$).

A 2.30 kifejezés alapján a különböző lézertimpulzusokhoz tartozó ionizációs valószínűség-sűrűségeket határoztam meg felhasználva a Volkov és a numerikusan számolt $c(\vec{k}, t)$ sorfej-



3.4. ábra. $2p$ állapot betöltöttségi valószínűsége az idő függvényében különböző intenzitású lézerimpulzusok esetén.

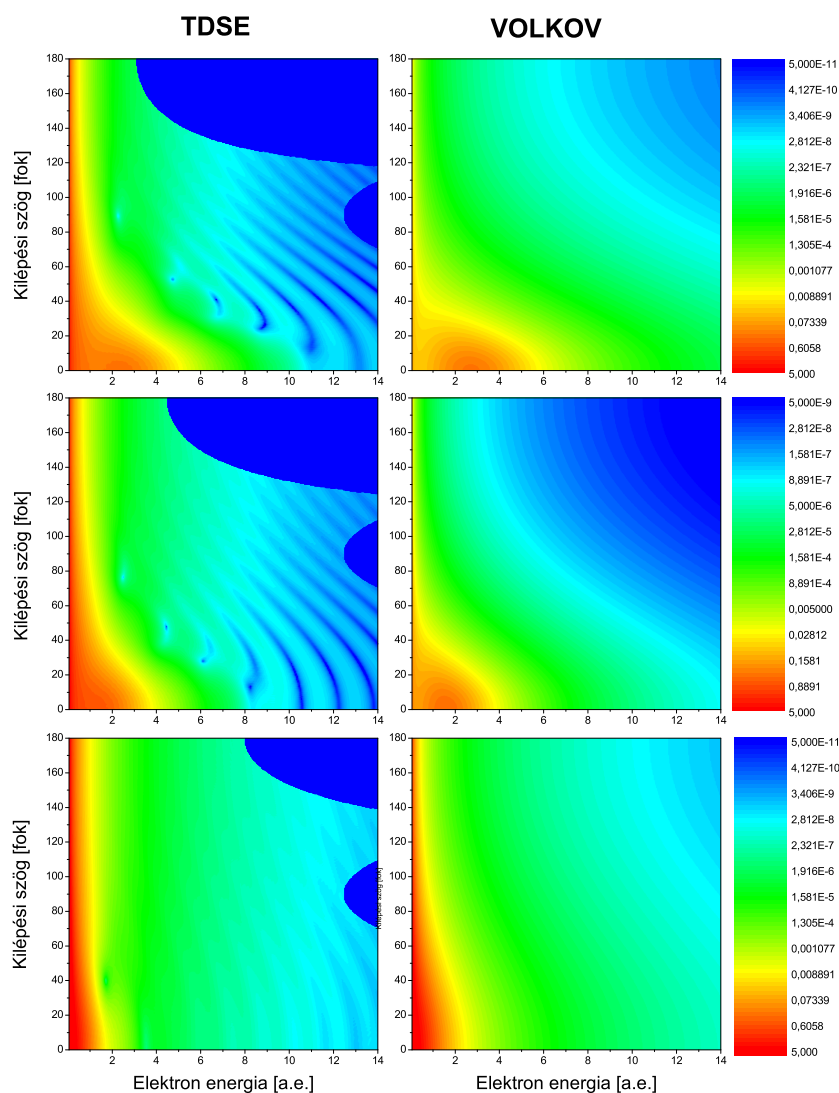
tési együtthatókat. Ezek közül ábrázoltam néhányat (3.6 ábra), ahol az első oszlopban a TDSE modell (Schrödinger-egyenlet numerikus megoldása - Time Dependent Schrodinger Equation), míg a második oszlopban a Volkov modell eredményei találhatók különböző lézerintenzitásokra. Megfigyelhető, hogy mindkét modell esetén az elektronok a legnagyobb valószínűséggel a lézertér polarizációs irányában lépnek ki, miközben energiájuk $\vec{A}(\tau)^2/2$, ahol $A\tau$ megegyezik a lézertér által az elektronnak átadott impulzus értékével. A TDSE modell alapján számolt ionizációs valószínűségről megfigyelhető az egymást követő maximumok sorozata. Ezen maximumok közötti távolság állandó, ami a több fotonos ionizáció (küszöb feletti ionizáció) jelenlétének bizonyítéka. Mivel ezen maximumok intenzitása lényegesen kisebb a globális maximum intenzitásánál, a több fotonos ionizációs mechanizmus csak másodlagos szerephez jut a domináns alagút és a direkt ionizációs mechanizmusok mellett. Ezen egyenlőközű maximumok teljesen hiányoznak a Volkov-modell alapján számolt valószínűségről estén, ami annak bizonyítéka, hogy a Volkov-modell nem alkalmas a többfotonos ionizáció leírására.



3.5. ábra. Az $1s$, $2s$, $2p$ állapotok betöltöttségi valószínűsége az idő függvényében. A lézertér paraméterei: $\omega = 0.05$ a.e., $E_0 = 0.6$ a.e., $\tau = 5$ a.e.

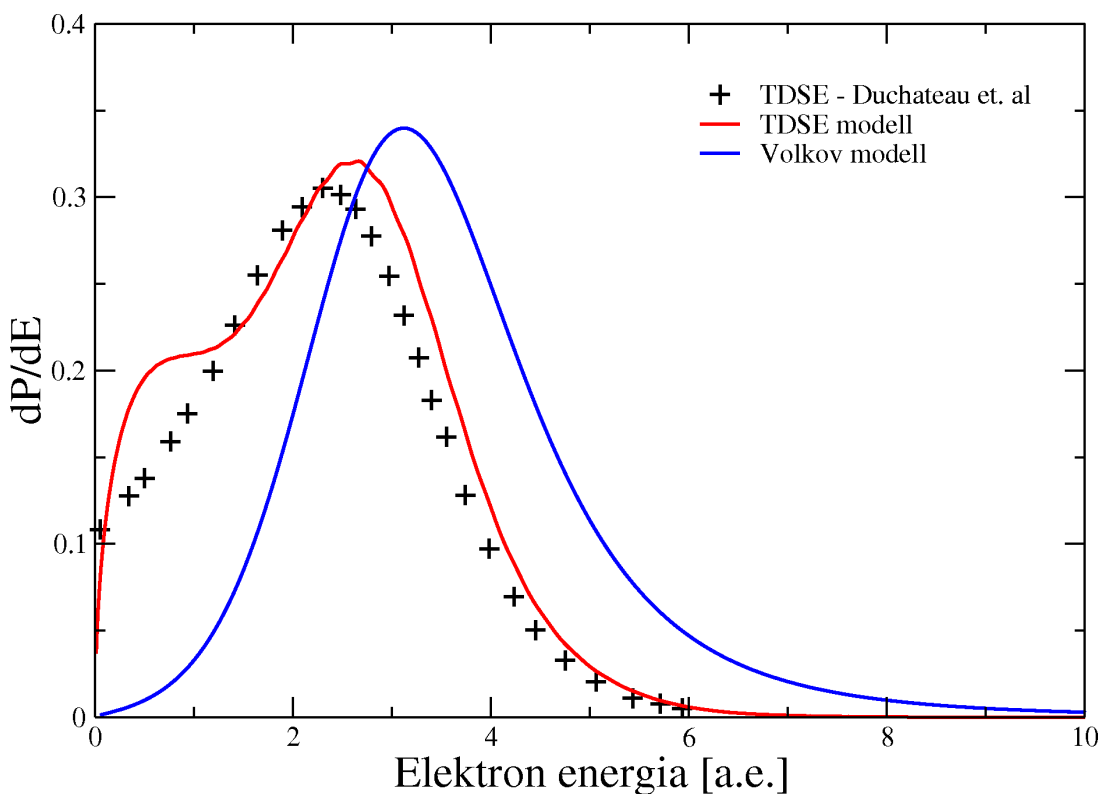
Az ionizációs valószínűségrés az elektron energiájának függvényében megkapható, ha a 2.30 kifejezést az elektron kilépési iránya szerint integráljuk. A $\tau = 5$ a.e., $E_0 = 1$ a.e. és $\omega = 0.05$ a.e. paraméterekkel jellemezhető lézerimpulzusra számolt ionizációs valószínűséget ábrázoltam a 3.7 ábrán. A TDSE és a Volkov-modell segítségével kapott valószínűségrés mellett feltüntettem a szakirodalomban megtalálható pontos TDSE valószínűségrés is [8]. Az ábrán megfigyelhető, hogy a nagy energiákon (elektron energia > 4 a.e.) a jelen TDSE számolás és az "egzakt" TDSE számolás jól egyezik. Ugyanakkor különbség figyelhető meg kisebb energiákon (2 a.e. $<$ elektron energia < 4 a.e.), ahol a jelen TDSE számolásból kapott valószínűségi görbe kissé eltolódva a nagyobb energiák irányába. Ez az eltolódás annak tulajdonítható, hogy a szabad elektronok leírására síkhullámokat (lásd 2.29) használtam az egzakt Coulomb hullámfüggvények helyett. Kiseb energiák esetén a TDSE számolásom hibás eredményeket szolgáltat. Ez ugyancsak az alkalmazott síkhullám-közelítésnek tulajdonítható, mivel a numerikusan számolt sorfejtési együtthatók által megadott hullámfüggvény tartalmazza

a kötött állapotokat is, mint ahogy ezt korábban megfigyelhettük a 3.2, 3.3, 3.4 ábrákon. A szabad elektronok leírására használt síkhullámok nem ortogonálisak a kötött állapotokra,



3.6. ábra. Ionizációs valószínűsége sűrűség a kilépő elektron energiájának függvényében. A lézerimpulzusok hossza $\tau = 5$ atomi egység, a térerősségvektor amplitúdója: első sor $E_0 = 1$ atomi egység, második sor $E_0 = 0.8$ atomi egység, harmadik sor $E_0 = 0.4$ atomi egység.

ezért a számolt ionizációs valószínűségben megjelenik a kötött állapotok hozzájárulása is. Ez a hibaforrás kiküszöbölhető Coulomb hullámfüggvények használatával, azonban ennek hátránya, hogy időigényes numerikus számolásokat igényel. Az ionizációs valószínűségek számolása során a legjelentősebb hibát az időtől függő hullámfüggvényben jelenlevő kötött állapotok okozzák. A numerikus propagálás során kapott hullámfüggvényt a kötött állapotokat leíró hullámfüggvényekkel ortogonálisálva ez a hiba viszonylag könnyen, numerikus számolásokkal kiküszöbölhető. A Volkov-modell alapján számolt valószínűsűrűség kvalitatív egyezést mutat a pontos eredménnyel, de kvantitatív számolásokra nem alkalmas.



3.7. ábra. Ionizációs valószínűsűrűség a kilépő elektron energiájának és kilépési irányának függvényében. A lézimpulzusok hossza $\tau = 5$ atomi egység, a térerővektor amplitúdója $E_0 = 1$ atomi egység.

4. fejezet

Következtetések

A dolgozatomban a hidrogénatom lézertérbeli viselkedésének vizsgálatát tűztem ki célul. A hidrogénatom gerjesztését és ionizációját tanulmányoztam. Számolásaim az időtől függő Schrödinger-egyenlet numerikus megoldásán alapulnak. A modellemben az időtől függő hullámfüggvényt egy egyenlő közül rácson reprezentáltam. Az adott rácson diszkretizált Schrödinger egyenletet negyedrendű Runge-Kutta módszer segítségével oldottam meg. Az így kapott pontos numerikus hullámfüggvényt felhasználva a kötött állapotok telítettségét számoltam a lézertér intenzitásának függvényében. Az 1s állapot telítettségét vizsgálva megfigyeltem, hogy nagy intenzitások esetén nagyon rövid idő alatt az 1s állapot nagymértékben kiürül. A 2s és 2p állapotok telítettségét összehasonlítva megállapítottam, hogy a $1s \rightarrow 2s$ kisebb valószínűséggel történik meg, mint az $1s \rightarrow 2p$ átmenet. Ez az impulzusnyomaték megmaradásával magyarázható, amely következtében az $1s \rightarrow 2s$ átmenet során az elektronnak két fotont kell elnyelnie, míg a $1s \rightarrow 2p$ során csak egyet. A rendelkezésemre álló hullámfüggvényt felhasználva ionizációs valószínűségről számoltam, amely alapján sikerült a domináns ionizációs mechanizmusokat azonosítani. Nagy intenzitás esetén az elektronok alagút- és direkt ionizáció révén válnak szabaddá. A modellem alapján számolt ionizációs valószínűségről összehasonlítottam a szakirodalomban fellelhető adatokkal, amelyekkel jó egyezést mutattak. A jó egyezés ellenére kis elektron energiáknál kisebb eltéréseket figyeltem meg. Ezen eltérések annak tulajdoníthatók, hogy a szabad elektronok leírására használt síkhullámok nem ortogonálisak a kötött állapotú hullámfüggvényekre, valamint a síkhullámok nem írják le pontosan a szabad

elektronokat A fenti hibaforrások kiküszöbölhetőek ha a jövőben a síkhullámok helyett a pontos Coulomb hullámfüggvényeket használom.

Irodalomjegyzék

- [1] V. Yanovsky et. al., Optics Express **16**, 2109 (2008).
- [2] M. Y. Shverdin, D. R. Walker, D. D. Yavuz, G. Y. Yin, and S. E. Harris, Phys. Rev. Lett. **94**, 033904 (2005).
- [3] I. Ratkay-Traub et. al., Ophthalmology Clinics of North America **14**, 347,(2001).
- [4] H. Hirase, V. Nikolenko, J. H. Goldberg, R. Yuste, J. Neurobiol. **51**, 237 (2002).
- [5] Kohama et. al., Nature **412**, 798 (2001).
- [6] W. Yu et. al., Laser and Particle Beams **25**, 41 (2007).
- [7] S. Borbely, K. Tőkési, L. Nagy, Phys. Rev. A **77**, 033412 (2008).
- [8] Duchateau et. al., J. Phys. B **33**, L571 (2000).