

ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ
V PRAZE
Fakulta Jaderná a Fyzikálně Inženýrská
Katedra Fyziky



Bakalářská práce

**Generace attosekundových impulsů pomocí
intenzivního femtosekundového laseru**

Jan Vábek

Školitel: Ing. Jaroslav Nejdl, Ph.D.

Praha, 2014

NASCANOVAT PODEPSANE ZADANI A
ULOZIT DO DVOU EPS SOUBORU
ZADANI1.EPS a ZADANI2.EPS

NASCANOVAT PODEPSANE ZADANI A
ULOZIT DO DVOU EPS SOUBORU
ZADANI1.EPS a ZADANI2.EPS

Prohlášení:

Prohlašuji, že jsem svou bakalářskou práci vypracoval samostatně a použil jsem pouze podklady (literaturu, software, atd.) uvedené v přiloženém seznamu.

Nemám závažný důvod proti užití tohoto školního díla ve smyslu § 60 Zákona č. 121/2000 Sb., o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon).

V Praze dne

Title:

Generation of attosecond light pulses by intense femtosecond laser

Author: Jan Vábek

Specialization: Mathematical physics

Sort of project: Bachelor thesis

Supervisor: Ing. Jaroslav Nejdl, Ph.D.

Abstract: This work describes the process of the High Harmonics Generation and conditions for single attosecond pulse creation. The theory needed to understand the basic principles is presented and a solution in the Strong field approximation (SFA) is derived. A computer model based on the SFA is created in MATLAB®. Practical examples to support the discussed theory are shown. The High Harmonics Generation is placed in the context of present sources of high energy radiation and these sources are introduced at a basic level.

Key words: High Harmonics Generation, Strong field approximation, Three step model, attosecond light pulses, intense laser, high-energy-radiation sources, Saddle point approximation

Název práce:

Generace attosekundových impulsů pomocí intenzivního femtosekundového laseru

Autor: Jan Vábek

Abstrakt: Tato práce se věnuje především generaci vysokých harmonických frekvencí a podmínkám pro vytvoření jediného attosekundového impulzu. Je zde představena teorie potřebná k pochopení základních principů a provedeno řešení v approximaci silného pole (SFA). Je vytvořen počítačový model v programu MATLAB® na základě SFA. V tomto modelu jsou vytvořeny praktické příklady ilustrující probranou teorii. Generace vysokých harmonických je zařazena do kontextu aktuálně používaných zdrojů krátkovlnného záření, které jsou zde základně představeny.

Klíčová slova: Generace vysokých harmonických frekvencí, approximace silného pole, tříkrokový model, attosekundové impulzy, intenzivní laser, zdroje vysokoenergetického záření, approximace sedlového bodu

Poděkování

Rád bych poděkoval svému vedoucímu Ing. Jaroslavu Nejdlovi, Ph.D. za zajímavé téma a podnětné konzultace. Dále patří velký dík mé rodině za podporu a zázemí, které mi umožňuje studovat.

Obsah

Použité značení a konstanty	1
Úvod	2
1 Moderní zdroje krátkovlnného záření	3
1.1 Röntgenova trubice	3
1.2 Záření horkého plazmatu	4
1.3 Plazmatické rentgenové lasery	4
1.4 Záření relativistických elektronových svazků	5
1.4.1 Synchrotron	5
1.4.2 Lasery na volných elektronech	6
1.4.3 Plazmatický betatron	6
1.4.4 Inverzní Comptonův rozptyl	7
1.5 Generace vysokých harmonických frekvencí	7
2 Popis budícího pulzu: Gaussovský impulz a Gaussovský svazek	9
2.1 Časová závislost (Gaussovský impulz)	9
2.2 Gaussovský svazek	9
2.3 Výsledný popis budícího pulzu	11
2.4 Určení amplitudy elektrického pole \mathcal{E}_0 pomocí intenzity dopadajícího záření	12
3 Teorie generace vysokých harmonických frekvencí: jednoatomová odezva	13
3.1 Režimy ionizace silným elektromagnetickým polem	13
3.2 Tříkrokový model	13
3.3 Klasické přiblížení tříkrokového modelu	15
3.4 Kvantový popis aproximací silného pole (SFA)	16
3.4.1 Záření pohybujícího se náboje	16
3.4.2 Kvantový popis interakce elektronu s budícím polem	17
3.4.3 Časový vývoj hybnosti	19
3.4.4 Střední hodnota polohy elektronu	20
3.4.5 Aproximace sedlového bodu	20
3.5 Spektrum výsledného pulzu	21
3.6 Vyprázdnění základního stavu - ADK model	22
4 Popis vygenerovaného záření	23
4.1 Šíření intenzivního laserového impulzu v plynném prostředí	23
4.1.1 Lineární disperzní médium	23
5 Vytvoření jediného attosekundového impulzu	25
5.1 Krátké budící pulzy (\sim fs)	25
5.2 Dlouhé budící pulzy (\sim 10 fs)	25
5.2.1 Dva kruhově polarizované budící pulzy	26
5.2.2 Dvoubarevné pulzy	27
6 1-D model generace vysokých harmonických frekvencí	28
6.1 Algoritmus pro popis generace pulzu v disperzním médiu	28
6.2 Algoritmus pro jednoatomovou odezvu.	29
6.3 Výpočet pomocí programu MATLAB®	29
6.4 Výsledky	30
6.4.1 Generace lichých harmonických frekvencí, tvar spektra	31
6.4.2 Gouyův fázový posuv, disperze generovaných impulzů v médiu	32
6.4.3 Maximální energie generovaného záření, cutoff	33
6.4.4 Spektrální filtr	34

6.4.5	Závislost spektra generovaného pulzu na délce budícího pulzu	35
6.4.6	Generace jediného attosekundového impulzu krátkým budícím pulzem	36
6.4.7	Chirpované budící pulzy	37
7	Závěr	39
7.1	Výhled	39
8	Použitá literatura	40
Dodatky		43
A	Saddle point approximation	43
A.1	Jednorozměrný případ	43
A.2	Vícerozměrný případ	43
A.3	Komplexní případ	44
B	Atomové jednotky (a.u.)	46
C	Zdrojový kód programů	47

Použité značení a konstanty

Použité značení:

\mathbf{a}	vektor a
a_i	i -tá složka vektoru \mathbf{a}
\hat{A}	Operátor A
\mathbb{A}	Matici A
\mathbb{C}	množina komplexních čísel
$\delta(\mathbf{x})$	Diracova delta funkce
$\partial_\xi f = \frac{\partial f}{\partial \xi}$	derivace funkce f podle ξ
$\det \mathbb{A}$	determinant matice \mathbb{A}
div	operátor divergence
e	Eulerovo číslo
$\mathcal{F}[f]$	Fourierova transformace funkce f
$\Gamma(\xi)$	Gamma funkce v bodě ξ
\mathbf{i}	imaginární jednotka
\mathbb{R}	množina reálných čísel
\mathbb{R}_+	množina nezáporných reálných čísel
rot	operátor rotace
\mathcal{S}	akce fyzikálního systému
\mathbb{N}	množina přirozených čísel
\mathbb{Z}_+	množina nezáporných celých čísel
$\bar{\xi}$	Číslo komplexně sdružené k číslu ξ
$\text{Im}\xi$	Imaginární část čísla ξ
$\text{Re}\xi$	Reálná část čísla ξ
$\langle A \rangle_{ \psi\rangle}$	Střední hodnota veličiny příslušející \hat{A} ve stavu $ \psi\rangle$
$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$	skalární součin vektorů \mathbf{u} a \mathbf{v}
$\mathbf{u} \times \mathbf{v}$	vektorový součin vektorů \mathbf{u} a \mathbf{v}
$\ v\ $	norma vektoru v
$[\hat{A}, \hat{B}]$	komutátor operátorů \hat{A} a \hat{B}
\triangle	Laplaceův operátor

Použité fyzikální konstanty:

α	$= 7.297352569824 \cdot 10^{-3}$	konstanta jemné struktury
c	$= 299792458 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$	rychlosť svetla ve vakuu
e	$= 1.602176565 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	náboj elektronu
ε_0	$= \frac{1}{\mu_0 c^2}$	permitivita vakuu
\hbar	$= 1.054571726 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$	redukovaná Planckova konstanta
k_B	$= 1.3806488 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$	Boltzmannova konstanta
m_e	$= 9.10938291 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$	hmotnosť elektronu
μ_0	$= 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ H} \cdot \text{m}^{-1}$	permeabilita vakuu

Úvod

Generace velmi krátkých optických impulzů pomocí vysokých harmonických frekvencí je oblast, která prochází velmi rychlým vývojem v posledních letech. K tému zdrojům se upíná velká pozornost, protože nám umožňují zkoumat procesy na časových škálách, které byly dosud jinými prostředky nedostupné. Nejdůležitějšími milníky v této oblasti jsou bezpochyby teoretický koncept laseru, který byl představen Albertem Einsteinem, dále jeho praktická realizace v roce 1960. Teoretický koncept generace vysokých harmonických frekvencí byl představen počátkem devadesátých let a první attosekundové impulzy byly připraveny v laboratoři na přelomu tisíciletí.

Stručně představíme členění této práce pro jednodušší orientaci v následujícím textu. V práci se zabýváme generací attosekundových světelných impulzů pomocí intenzivního budícího femtosekundového pulzu¹ v plynném prostředí. V první kapitole jsou představeny moderní zdroje krátkovlnného záření. Tato kapitola nemá přímou návaznost na další kapitoly, v tom smyslu, že se na ni dále neodkazujeme, nicméně je důležitá pro praktickou představu účelu této práce a zařazení generace vysokých harmonických frekvencí do kontextu dnes používaných a vyvíjených zdrojů krátkovlnného záření. Druhá kapitola probírá nezbytné znalosti o budícím pulzu a jeho matematický popis. Na tuto kapitolu navazuje třetí kapitola, která představuje jednoatomární model interakce atomů plynu s budícím pulzem tzv. *Tříkrokový model*, nejprve je pro představu uveden model pomocí klasické fyziky a poté následuje kvantověmechanické řešení. Čtvrtá kapitola popisuje propagaci vznikajícího pulzu v plynném prostředí. Pátá kapitola se zabývá způsoby, jak vytvořit jediný attosekundový impulz. V šesté kapitole je stručně popsán 1D model celého procesu v programu MATLAB®. Poslední kapitola shrnuje dosažené výsledky práce a možnost generace vysokých harmonických frekvencí budícího pole jednotlivých attosekundových pulzů. Po seznamu literatury následují tři dodatky. V prvním je představena metoda aproximace sedlového bodu, která se používá k výpočtu určitých integrálů typu $\int f(x)e^{Ag(x)} dx$, v druhém je definována soustava atomových jednotek a transformační vztahy se soustavou SI a v posledním je ukázka kódů vytvořeného modelu.

¹Rozdíl mezi slovem pulz a impulz není zcela jasně vymezen. V této práci budeme používat slovo pulz převážně v souvislosti s elektromagnetickým polem budícího laseru a impulz v souvislosti s vygenerovaným polem. Slovo impulz zdůrazňuje, že se jedná o právě jeden průběh záhvědu elektromagnetického pole.

1 Moderní zdroje krátkovlnného záření

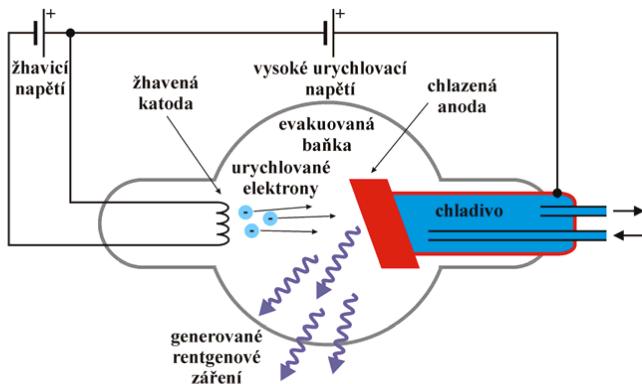
Nejprve je třeba určit jaké vlnové délky, případně energie považujeme za krátkovlnné záření. V rámci této práce za krátkovlnné záření považujeme záření s vlnovou délkou (ve vakuu) kratší než 40 nm, což odpovídá energiím větším než 30 eV. Tato oblast spektra se dále dělí na oblasti vzdáleného ultrafialového spektra s vlnovými délками v rozmezí 5 nm až 40 nm, což odpovídá energiím v rozmezí 30 eV až 250 eV, měkké rentgenové záření s vlnovými délками 100 pm až 5 nm (energie 250 eV až 12.4 keV), tvrdé rentgenové záření s vlnovými délками 10 pm až 100 pm (energie 12.4 keV až 124 keV) a záření γ s vlnovou délkou kratší než 10 pm a energií větší než 124 keV. Protože je elektromagnetické spektrum spojité, není tato definice zcela striktní a jednotlivé oblasti se mohou překrývat, jelikož různé vědecké komunity používají svá rozmezí. V podstatě známe dva způsoby, jak lze v dnešní době generovat krátkovlnného záření.

Jedním z nich je záření vznikající při zrychlení pohybujícího se náboje. Druhým způsobem jsou kvantové přechody mezi hladinami s různou energií v atomovém obalu nebo v jádře. V následujících oddílech si stručně představíme jednotlivé dnes používané zdroje, jejich princip a aplikace, které více rozvedeme v případě generace vysokých harmonických frekvencí. Tento přehled má být jen rychlým úvodem do dané problematiky, prostý od odvozování potřebných vztahů a detailních popisů.

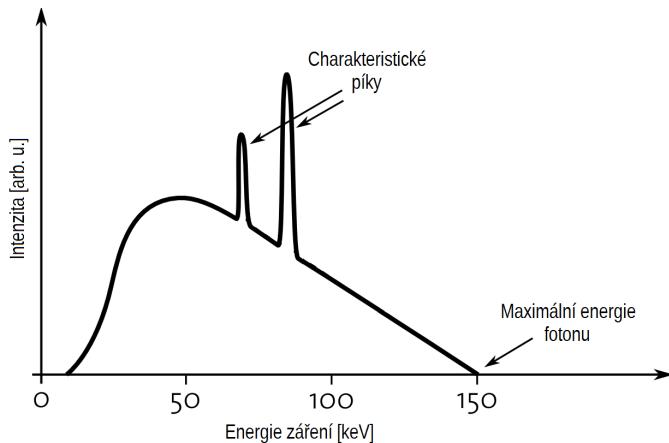
1.1 Röntgenova trubice

Poprvé se problematikou krátkovlnného záření zabývali vědci v druhé polovině 19. století. Jedním z nich byl Wilhelm Conrad Röntgen, který sestrojil Röntgenovu trubici a pozoroval nové *paprsky X*, svůj objev poprvé oficiálně zmínil v dopise Würzburgské lékařské společnosti v roce 1895 a byla mu za tento objev udělena vůbec první Nobelova cenu za fyziku v roce 1901. Röntgenova trubice se používá dodnes a má uplatnění především v analýze materiálů a v lékařství k diagnostice.

Princip funkce je následující. V trubici je vyčerpán vzduch a jsou v ní umístěny dvě elektrody (anoda a katoda), mezi kterými je silné elektrické pole. Katoda je žhavena a v důsledku termoemise se z ní uvolní elektrony, které jsou elektrickým polem urychleny na energii v řádu keV a poté narazí na anodu, kde vlivem prudkého zbrzdění vzniká tzv. brzdné záření. Účinnost konverze kinetické energie elektronů na rentgenové záření je velmi nízká a většina energie se přeměňuje na teplo, proto je nutno anodu chladit. Vzniklé záření je nekoherentní a polychromatické. Navíc mohou být při nárazu vyraženy elektrony z vnitřních slupek atomů anody. Tyto elektrony jsou rychle nahrazovány a vznikají tak charakteristické páky odpovídající přechodům mezi jejich energetickými hladinami. Výsledné spektrum je znázorněno na obrázku 2.



Obrázek 1: Schéma Röntgenovy trubice. Převzato z [32].



Obrázek 2: Spektrum záření rentgenky. Převzato z [36], upraveno.

1.2 Záření horkého plazmatu

Podle Planckova vyzařovacího zákona víme, že hustota energie tepelného záření ρ absolutně černého tělesa o teplotě T a odtud vlnová délka λ_{\max} s největším zastoupením ve vzniklém spektru jsou

$$\rho(\lambda, T) = \frac{16\hbar\pi^2 c}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{2\pi\hbar c}{k_B T \lambda}} - 1}, \quad \lambda_{\max} \doteq \frac{2\pi\hbar c}{2.822 \cdot k_B T}.$$

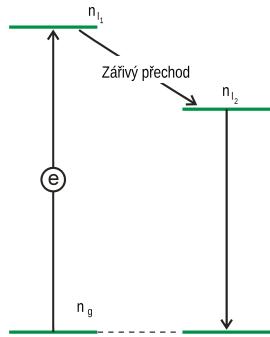
Pokud použijeme plazma s teplotou v řádu 10^6 K bude podstatná část spektra vyzařování v rentgenovské oblasti.

Jedním z možných způsobů přípravy takto horkého plazmatu je interakce laserového pulzu s pevným nebo kapalným terčem. Při tomto způsobu přípravy vznikají kromě horkého plazmatu také rychlé elektrony, které se zbrzdí v pevném terči, vzniká tak brzdné a charakteristické záření s podobným spektrem, jako má Röntgenova trubice. Výsledné spektrum je pak kombinací obou jevů.

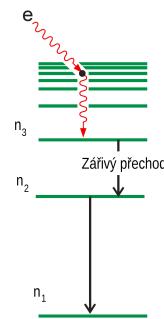
1.3 Plazmatické rentgenové lasery

Základem tohoto zdroje je vytvoření inverze populace dostatečně energeticky vzdálených hladin ve sloupci mnohonásobně ionizovaného plazmatu. Toto plazma může být vytvořeno buď interakcí silného laserového pulzu s pevným terčem, nebo pomocí krátkého elektrického výboje v plynu, tzv. *z-pinch*, elektrický proud v tomto výboji dosahuje desítek kA. Vhodným nastavením lze ve směru osy sloupce plazmatu dosáhnout krátkodobé inverze populace a tím může vzniknout zesílené záření podobně jako u klasického laseru. Uvedeme dva nejrozšířenější způsoby vytvoření inverze populace, prvním je tzv. *rekombinační schéma*, zcela ionizované atomy plazmatu jsou zpátky osazovány elektrony a v důsledku toho, že např. přechod mezi druhou a první hladinou probíhá s větší pravděpodobností než mezi třetí a druhou hladinou, nastane inverze populace mezi druhou a třetí hladinou. Druhé je tzv. *srážkové excitační schéma*, vycházíme obvykle z iontu s uzavřenou elektronovou slupkou, z tohoto iontu je srážkou s volným elektronem excitován elektron na nějakou z vyšších energetických hladin odtud postupně sestupuje zpět. Nejprve přejde na horní laserovou hladinu n_{l_1} se zakázaným přechodem na základní hladinu n_g , z horní laserové hladiny pak přechází na dolní laserovou hladinu n_{l_2} , ze které klesá na základní hladinu n_g s větší rychlostí, než má přechod mezi n_{l_1} a n_{l_2} , čímž vzniká mezi laserovými hladinami inverze populace a jsou splněny podmínky pro vznik laserového záření. Který z těchto dvou procesů nastane závisí na parametrech vzniku plazmatu. Oba tyto procesy jsou zjednodušeně načrtnutý na obrázcích 3 a 4.

Jak již bylo zmíněno, lze inverze populace dosáhnout pouze krátkodobě, proto tento zdroj pracuje v pulzním režimu. Velkou výhodou je monochromaticnost vzniklého záření a možnost vytvořit zařízení v menším provedení, než většina ostatních uvedených zdrojů. Vývoj plazmatických rentgenových laserů není ještě dokončen a v budoucnu by kvůli menší velikosti a nižší finanční náročnosti mohly nahradit některé současně používané zdroje. Podrobné informace o plazmatických rentgenových laserech zdrojích lze nalézt v [7].



Obrázek 3: Srážkově excitační schéma.
Převzato z [26], upraveno.



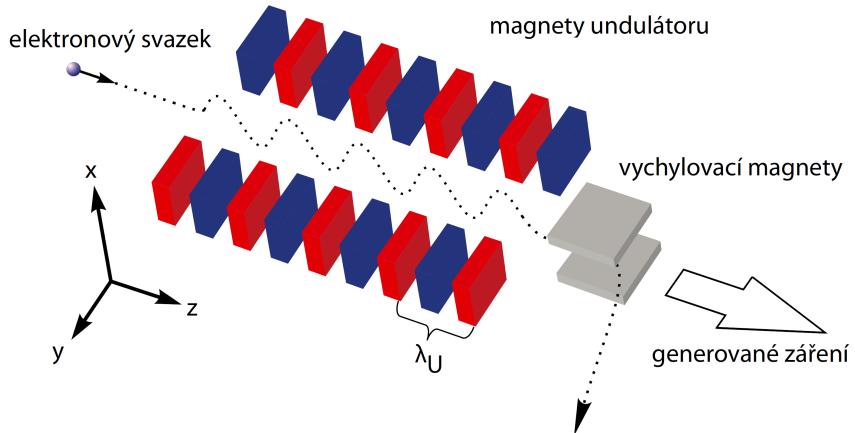
Obrázek 4: Rekombinační schéma.
Převzato z [26], upraveno.

1.4 Záření relativistických elektronových svazků

Zdroje v následujících oddílech mají společný princip vzniku záření a liší se svojí praktickou realizací a z toho plynoucími vlastnostmi vzniklého záření. Základem je svazek relativistických elektronů, které jsou přinuceny elektromagnetickým polem konat periodický pohyb kolmo ke směru šíření svazku. Díky zrychlení elektronů v průběhu pohybu vzniká elektromagnetické záření. Zařízením, které způsobuje příčný pohyb elektronů se nazývá *undulátor* nebo *wiggler* (liší se v divergenci vzniklého záření [8] a pro základní popis není rozdíl podstatný, proto mezi nimi nebudeme rozlišovat), jak toto zařízení vypadá v klasickém případě je představeno v následujícím oddílu. Je přirozené popisovat vznik záření v současně soustavě spojené s elektronovým svazkem, protože v této soustavě konají elektrony pouze periodický pohyb. Při přechodu do laboratorní soustavy se uplatní Dopplerův efekt a pozorujeme tak záření s vyšší frekvencí a tedy i s vyšší energií. Obecný přehled a princip těchto zdrojů, kromě synchrotronů, je uveden v [8].

1.4.1 Synchrotrony

Jedná se o kruhové urychlovače, ve kterých se pohybují urychlené nabité částice, nejčastěji se jedná o elektrony. Synchrotrony nebyly původně určeny jako zdroje krátkovlnného záření, ale ke studiu elementárních částic a záření vznikalo pouze jako vedlejší produkt. U původních synchrotronů vznikalo záření pouze v důsledku dostředivého zrychlení, způsobeném zakřivením trajektorie pomocí ohybových magnetů. Tento způsob generace ale nebyl dostatečně výkonný. U dnešních synchrotronů sloužících ke generaci krátkovlnného záření se proto používají navíc undulátory (a wiggery). Undulátor je zařízení na jehož stranách se nachází magnety, které donutí urychlené elektrony periodicky oscilovat. Během těchto oscilací elektrony vyzařují ve směru šíření elektronového svazku. Dnešní urychlovače proto nejsou kruhové, ale složené z mnoha přímých úseků, takže výsledný urychlovač má tvar pravidelného mnohoúhelníku. Obvykle také nejsou částice urychlovány ve velkém urychlovači z klidu, ale před vstupem do největšího okruhu jsou již urychleny pomocí lineárních urychlovačů, případně pomocí soustavy menších kruhových urychlovačů. Výsledné záření má velmi nízkou divergenci svazku, vysokou intenzitu a obsahuje širokou škálu vlnových délek. Požadované vlnové délky je možné získat užitím různých filtrů. Nevýhodou je značná pořizovací cena urychlovače a také prostorová náročnost. Přehled některých dnes používaných synchrotronů lze nalézt on-line na [37].



Obrázek 5: Schéma undulátoru, který je používán ke vzniku záření v laseru na volných elektronech. Převzato z [10].

1.4.2 Lasery na volných elektronech

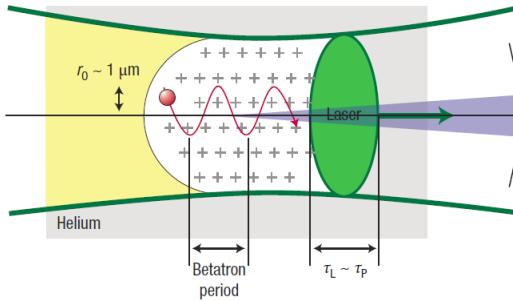
Princip laserů na volných elektronech je podobný jako u synchrotronů a využívá se také relativistických elektronových svazků. Elektrony jsou urychljeny zpravidla lineárním urychlovačem, po urychlení vstupují do undulátoru, kde elektrony začnou příčně oscilovat. Díky této oscilaci vzniká záření, které se pohybuje spolu se svazkem elektronů. Oproti synchrotronům je zařízení nastaveno tak, že se elektrony pohybují ve shlucích² a díky tomu vzniká na rozdíl od synchrotronů koherentní a podstatně intenzivnější záření, protože elektrony z celého microbunche září koherentně. Na konci zařízení jsou umístěny vychylovací magnety, které odkloní elektronový svazek a v původním směru pokračuje pouze vygenerované záření. Vznik záření v rentgenovském oboru je technicky náročný a vyžaduje použít kilometrové urychlovače a undulátory s řádovou délkou 100m. Mezi nyní ve světě používané zařízení pro generaci krátkovlnného záření patří LCLS (Linac Coherent Light Source) v USA a SACLA v Japonsku. Nyní se buduje XFEL (European x-ray free electron laser) poblíž Hamburgu, který má být uveden do provozu na konci roku 2015 [38]. Aktuální přehled principu a aplikací laserů na volných elektronech je uveden v [8, 10].

1.4.3 Plazmatický betatron

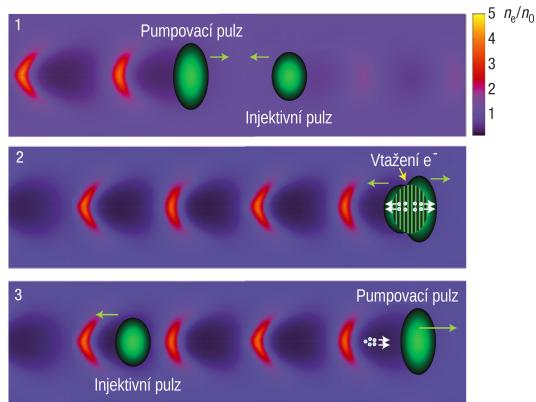
Počátky technologie těchto zdrojů spadají do 80. let 20. století, kdy se poprvé začalo uvažovat o možném urychlování elektronů na plazmatické vlně vytvořené laserem. Princip spočívá v tom, že do plazmatu je vstřelen krátký intenzivní pulz, těsně za tímto pulzem vzniká bublina kladného náboje. Do této bubliny mohou být z boku vtaženy volné elektrony, které v ní začnou kmitat kolmo ke směru šíření pulzu. Vlivem těchto kmítů vzniká záření, které se šíří ve směru budícího pulzu. Funkci undulátoru tady vlastně zastává samotné rozložení náboje v bublině. Tento proces je znázorněn na obrázku 6. Druhou možností je elektrony do bubliny dodávat uměle pomocí slabšího *injektivního pulzu*, který se pohybuje proti budícímu pulzu (ten se v tomto schématu nazývá *pumpovací pulz*). Když se oba pulzy setkají, tak se do bubliny za pumpovacím pulzem injektují elektrony stržené injektivním pulzem skrz čelo tohoto pulzu (viz obrázek 7). Výsledné záření má nízkou divergenci a je polychromatické, podobně jako u synchrotronů. Podrobněji o těchto zdrojích informuje [9].

Výroba takových zdrojů je stále velmi nákladná, protože je potřeba laserový systém schopný generovat záření o intenzitě $\sim 10^{19} \text{ W} \cdot \text{cm}^{-2}$. Nicméně v principu mohou být tyto zdroje mnohem kompaktnější než velké urychlovače, či lasery na volných elektronech a mohly by nalézt široké využití v medicíně a v materiálovém inženýrství.

²Pro tyto shluky se užívá anglický termín *microbunch*.



Obrázek 6: Princip vzniku záření v plazmatickém betatronu. r_0 udává velikost oscilací elektronu v bublině za budícím pulzem, τ_L je délka trvání pulzu. Převzato z [9].

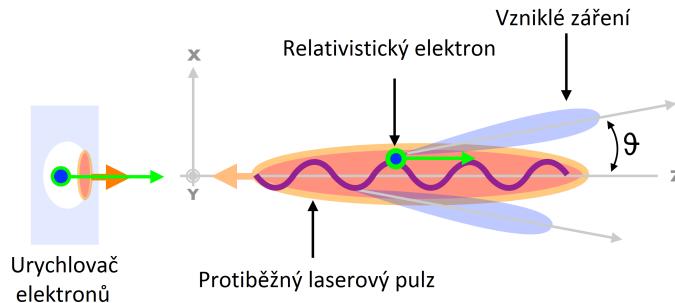


Obrázek 7: Schéma dodávání elektronů do bubliny za pumpovacím pulzem pomocí injektivního pulzu. n_e/n_0 udává lokální poměr mezi hustotou elektronů a kladně nabitéh iontů. Převzato z [9].

1.4.4 Inverzní Comptonův rozptyl

Základem tohoto zdroje jsou elektronový a intenzivní laserový svazek mířící proti sobě. Fotony z laserového svazku jsou rozptylovány na relativistických elektronech a vzniká záření ve směru elektronového svazku. Při detailnějším popisu můžeme laserový svazek šířící se proti elektronovému považovat za undulátor a mechanismus popisovat podobným způsobem jako u laserů na volných elektronech. Díky tomu, že undulátor není v tomto případě statický, uplatní se při přechodu do laboratorní soustavy dvakrát Dopplerův jev a vzniká tak záření s velmi krátkou vlnovou délkou. Celý proces je znázorněn na obrázku 8.

Tento zdroj může vytvořit záření s energiemi v rádu MeV, což je více, než je možné dnes používanými zdroji, výsledné záření může být monochromatické a navíc je možno spojitě regulovat. Tyto zdroje mohou nalézt uplatnění v diagnostice materiálů a také v medicíně.



Obrázek 8: Schéma vzniku záření při inverzním Comptonově rozptýlu. Elektrony jsou v tomto případě urychljeny pomocí laserového svazku v plazmatu. Převzato z [8], upraveno.

1.5 Generace vysokých harmonických frekvencí

Tímto tématem se podrobněji zabývá zbytek této práce, proto zde pouze velmi stručně shrneme princip a aplikace. Tento zdroj je založen nelineární odezvě plynu při průchodu lineárně polarizovaného intenzivního laserového pulzu. Proces, který v médiu probíhá, lze přiblížit pomocí tříkrokového modelu. Během prvního a druhého kroku mohou být elektrony uvolněny polem la-

seru z atomů plynu a následně jsou tímto polem urychleny. Ve třetím kroku rekombinují zpět s materškým atomem za vyzáření fotomu s energií odpovídající součtu ionizační energie atomu a získané kinetické energie elektronu. Vzniká tak záření šířící se spolu s budícím pulzem. Díky periodicitě budícího pole se tento proces opakuje a vzniká série impulzů³ s délkou v řádu attosekund, jejich vzájemná vzdálenost odpovídá půlperiodě pole budícího laseru. Pro některé aplikace, které vyžadují extrémní časové rozlišení, je často potřebné vygenerovat namísto série impulzů pouze jediný impulz. Mechanismus, kterým toho lze dosáhnout je popsán v kapitole 5.

Díky velmi krátkému⁴ trvání vzniklých pulzů je možné tyto pulzy použít především k měření různých rychlých fyzikálních procesů. Jako příklad lze uvést studování časového vývoje polohy elektronů v elektronovém obalu atomů [13, 14, 19]. Další možnou aplikací je měřit za určitých podmínek přímo elektrické pole s nižšími frekvencemi, než je vzniklý pulz [15, 16]. Měřící metody založené na attosekundových impulzech mohou pomoci k hlubšímu pochopení hranic současně polovodičové techniky a v rozvoji nových technologií v oblastech spintroniky, plazmoniky, molekulární elektroniky a molekulátních nanostruktur [18, 19]. Attosekundové impulzy by také mohly přímo ovlivňovat chemické reakce a jejich produkty [19]. Procesy uvnitř atomového jádra probíhají na ještě kratších časových škálách v oblasti zeptosekund, abychom se mohli těmito procesům přiblížit, je třeba nalézt technologie, jak attosekundové impulzy ještě o řád zkrátit [20].

³Používá se běžně anglický termín *attosecond pulse train*.

⁴Abychom si uvědomili, v jak krátkých časových škálách se pohybujeme, je vhodné zmínit fakt, že trvání jednoho attosekundového impulzu ($\sim 10^{-17}$ s) v poměru k jedné sekundě, která je pro lidské vnímání dobré představitelná, je přibližně stejný jako poměr jedné sekundy k aktuálně předpokládanému stáří vesmíru ($\sim 4 \cdot 10^{17}$ s) [1].

2 Popis budícího pulzu: Gaussovský impulz a Gaussovský svazek

V této kapitole si představíme matematický model impulzů budícího laseru, který budeme potřebovat v dalších kapitolách. Pro model laserového pulzu je možno použít více možností, my si představíme tzv. *Gaussovský pulz*. Je třeba zmínit, že se nejedná o jedinou možnost volby a především v časové proměnné je možno se setkat i s jinými volbami [1, 2]. Nyní přejděme k samotnému odvození. Pro výpočty je nejvýhodnější veličinou k popisu intenzita elektrického pole \mathcal{E} . Při konstrukci Gaussovského pulzu vyjdeme z rovinné vlny. Pro jednoduchost uvažujeme lineárně polarizované světlo ve směru osy x . Budeme se zajímat o složky vektoru elektrického pole, které jsou dány pro rovinnou monochromatickou vlnu vztahy

$$\mathcal{E}_x(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E} \cos(\omega_0 t - kz + \varphi), \quad \mathcal{E}_y(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}_z(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (1)$$

\mathcal{E} je amplituda elektrického pole, ω_0 je *vlastní frekvence budícího laseru*, k je třetí složka *vlnového vektoru*, v našem případě je rovna *vlnovému číslu*, a φ je *fázový posuv*.

2.1 Časová závislost (Gaussovský impulz)

Lasery s nejvyšším špičkovým výkonem pracují výhradně v pulzním režimu a nevyzarujejí rovinné monochromatické vlny. Intenzita se mění s časem, toto můžeme popsat přidáním pomalu proměnné *obálky elektrického pole* $\mathcal{E} = \mathcal{E}(t)$, laser také nevysílá pole s konstantní fází, proto připustíme závislost $\varphi = \varphi(t)$. Omezíme se na zkoumání průběhu pole v počátku souřadnic $z = 0$. Pro popis obálky laserového pulzu se běžně používá Gaussovské funkce. Pole se kterým budeme pracovat dostane tak tvar

$$\mathcal{E}_x(t) = \mathcal{E}_0 e^{-2 \ln(2) \left(\frac{t}{\tau_g} \right)^2} \cos(\omega_0 t + \varphi(t)), \quad \mathcal{E}_y(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}_z(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (2)$$

\mathcal{E}_0 je amplituda elektrického pole, τ_g je *délka trvání pulzu*⁵ a jedná se o čas, během kterého okamžitá intenzita (viz oddíl 2.4) převyšuje polovinu maximální intenzity. Toto je nejobecnější tvar Gaussovského pulzu. Můžeme se setkat se speciálním tvarem závislosti fázového posuvu, pokud je $\varphi(t)$ kvadratickou funkcí ve tvaru $\varphi(t) = b_g t^2$, řekneme, že pulz je *chirpovaný* a b_g nazveme *parametr chirpu*. Gaussovský pulz pak můžeme popsat pomocí komplexního parametru

$$\Gamma_g = a_g + i b_g, \quad a_g = \frac{2 \ln 2}{\tau_g^2} \quad (3)$$

ve tvaru

$$\mathcal{E}_x(t) = \operatorname{Re} \left(\mathcal{E}_0 e^{-i \omega_0 t - \Gamma_g t^2} \right). \quad (4)$$

2.2 Gaussovský svazek

Reálnému laserovému pulzu jsme se už přiblížili v časovém průběhu, je třeba si uvědomit, že ani v prostorovém rozložení není intenzita konstantní. Pro jednoduchost opět vyjdeme z rovinné vlny. Rovinná vlna je řešením *vlnové rovnice*

$$\Delta \mathcal{E}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = 0, \quad (5)$$

v je rychlosť šíření světla v daném prostředí. Nejjednodušším netriviálním řešením této rovnice je rovinná vlna šířící se ve směru osy z $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}_0 e^{-i(\omega_0 t - kz)}$, opět jsme bez újmy na obecnosti zvolili směr šíření ve směru osy z . Pokusíme se opět vyjít z tohoto řešení a získat realističtější

⁵V angličtině se běžně používá zkratka FWHM - Full width at half maximum, tj. šířka v polovině výšky intenzity pulzu.

model laserového pulzu. Zkusíme najít řešení, pokud připustíme závislost $\mathcal{E}_0 = \mathcal{E}_0(\mathbf{r})$, dosazením do (5) dostaneme

$$\left(\frac{\partial^2 \mathcal{E}_0(\mathbf{r})}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathcal{E}_0(\mathbf{r})}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \mathcal{E}_0(\mathbf{r})}{\partial z^2} + 2ik \frac{\partial \mathcal{E}_0(\mathbf{r})}{\partial z} - k^2 \mathcal{E}_0(\mathbf{r}) + \frac{\omega^2}{v^2} \mathcal{E}_0(\mathbf{r}) \right) e^{-i(\omega t - kz)} = 0. \quad (6)$$

Z definice vlnového čísla $k = \frac{\omega_0}{v}$ se poslední dva členy odečtou. Dále učiníme fyzikální předpoklad, že se funkce $\mathcal{E}_0(\mathbf{r})$ mění pomalu vzhledem k prostorové souřadnici z , takže zanedbáme člen $(\partial^2/\partial z^2)\mathcal{E}_0(\mathbf{r})$, provedením těchto úvah dostaneme *paraxiální vlnovou rovnici* pro \mathcal{E}_0

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}_0(\mathbf{r})}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathcal{E}_0(\mathbf{r})}{\partial y^2} + 2ik \frac{\partial \mathcal{E}_0(\mathbf{r})}{\partial z} = 0. \quad (7)$$

Tuto rovnici nyní budeme řešit. Vzhledem k symetrii v proměnných x a y se pokusíme řešení najít ve tvaru $C \exp(i(\phi(z) + (x^2 + y^2)f(z)))$, kde ϕ a f jsou nové neznámé funkce a C nenulová konstanta. Pro přehlednost zavedeme novou proměnnou $\rho^2 = x^2 + y^2$, což odpovídá cylindrické transformaci s osou z . Dosazením předpokládaného řešení dostaneme rovnici

$$4if(z) - 4\rho^2 f^2(z) - 2k(\phi'(z) + \rho^2 f'(z)) = 0, \quad (8)$$

požadujeme aby tato rovnice byla splněna pro libovolné $(x^2 + y^2)$, proto je tato rovnost ekvivalentní dvěma nezávislým rovnicím

$$2if(z) - k\phi'(z) = 0, \quad 2f^2(z) + kf'(z) = 0. \quad (9)$$

Druhou rovnici můžeme rovnou vyřešit a psát

$$f(z) = \frac{k}{2(z - iz_R)} = \frac{k}{2} \left(\frac{z}{z^2 + z_R^2} + \frac{iz_R}{z^2 + z_R^2} \right), \quad (10)$$

kde iz_R je integrační konstanta a její volba bude objasněna později. Toto řešení dosadíme do rovnice pro ϕ' a integrací dostaneme

$$\phi(z) = i \ln \sqrt{z^2 + z_R^2} - \arctan \left(\frac{z}{z_R} \right) + C_\phi, \quad (11)$$

kde C_ϕ je integrační konstanta. Celkové řešení tak je

$$\mathcal{E}_0(\mathbf{r}) = \frac{C_0 \exp \left(-\frac{z_R(x^2 + y^2)}{(z^2 + z_R^2)} \right)}{\sqrt{z^2 + z_R^2}} \exp \left\{ i \left[\frac{kz(x^2 + y^2)}{2(z^2 + z_R^2)} - \arctan \left(\frac{z}{z_R} \right) \right] \right\}. \quad (12)$$

Toto řešení přepíšeme pomocí funkcí

$$w(z) = w_0 \sqrt{1 + \frac{z^2}{z_R^2}}, \quad R(z) = z + \frac{z_R^2}{z}, \quad \phi_G(z) = \arctan \left(\frac{z}{z_R} \right), \quad (13)$$

kde $w_0 = \sqrt{\frac{z_R \lambda}{\pi}}$, fyzikální smysl těchto úprav ozřejmíme po přepsání řešení, které tak dostalo tvar⁶

$$\mathcal{E}_0(\mathbf{r}) = C_0 \frac{w_0 e^{-\frac{x^2+y^2}{w^2(z)}}}{w(z)} e^{i\left(\frac{k(x^2+y^2)}{2R(z)} - \phi_G(z)\right)}. \quad (16)$$

Konstantu C_0 získáme z intenzity svazku. Podívejme se nyní na fyzikální význam ostatních konstant a funkcí. Snadno nahlédneme, že maximum elektrického pole na ose z se nachází v bodě 0, který proto nazveme *ohniskem*. Pokud se nyní podíváme na řešení v rovině $z = 0$. V polárních souřadnicích $\rho^2 = x^2 + y^2$ je $\mathcal{E}_0(x, y, z = 0) = C_0 \exp(-\rho^2/w_0^2)$, odtud vidíme, že w_0 je velikost poloměru kružnice ve které intenzita pulzu převyšuje 1/e maximální možné intenzity, w_0 proto nazveme *poloměr svazku v ohnisku*. z_R je vzdálenost, na které které intenzita pole klesne na polovinu maxima a nazveme ji *Rayleighova vzdálenost*. Jak je vidět ze zavedení w_0 , závisí tato vzdálenost na vlnové délce pulzu a na poloměru svazku. $\phi_G(z)$ nazýváme *Gouyův fázový posuv* a udává nám změnu fáze svazku ve směru šíření. $R(z)$ nazveme *zakřivení fázového čela vlny* a udává nám poloměr křivosti vlnoplochy, která prochází bodem $(0, 0, z)$. Celkové řešení ještě přepíšeme v příjemnějším tvaru

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}_0 \frac{w_0}{w(z)} \exp\left(-\frac{x^2+y^2}{w^2(z)}\right) \cos\left(\omega_0 t - k\left(z + \frac{x^2+y^2}{2R(z)}\right) + \phi_G(z)\right), \quad (17)$$

kde jsme využili faktu, že reálná část samostatně je také řešením.

2.3 Výsledný popis budícího pulzu

Nyní chceme získat model spojením obou předchozích. Tedy získat závislost jak časovou, tak prostorovou. Časovou závislost máme zachycenou pro konstantní souřadnici z . Zajímá nás jak se bude tato závislost vypadat obecně. Jak jsme již zmínili, model Gaussovskeho pulzu předpokládá časovou závislost obálky pulzu $\mathcal{E}_0(t)$. Víme, že pohyb obálky je popsán *grupovou rychlosí* v_g . Pro budící pulz předpokládáme, že se šíří bez disperze a stejnou rychlosí jako ve vakuu, proto platí $v_g = v = c$. Pokud tedy předchozí dvě řešení spojíme tak, že obálka nabývá maxima v bodě $z = 0$ v čase $t = 0$, bude dle předchozích úvah maximum pulzu v bodě $z = z_0$ v čase $t = z_0/v_g = z_0/c$. To znamená, že pro popis časového vývoje obálky použijeme retardovaný čas $t - z/c$. Celkový model získáme tím, že ve všech veličinách definujících časový Gaussovský pulz zaměníme $t \rightarrow t - z/c$. Výsledek dostaneme kombinací vztahů (2) a (17), tedy

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}_0 \frac{w_0}{w(z)} e^{-\frac{x^2+y^2}{w^2(z)} - 2\ln(2)\left(\frac{t-\frac{z}{c}}{v_g}\right)^2} \cos\left(\omega_0 t - k\left(z + \frac{x^2+y^2}{2R(z)}\right) + \phi_G(z) + \varphi\left(t - \frac{z}{c}\right)\right). \quad (18)$$

Případně pro chirpovaný pulz, lze použít zápisu

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}_0 \frac{w_0}{w(z)} \operatorname{Re} \left\{ \exp\left[-\frac{x^2+y^2}{w^2(z)} - i\left(\omega_0 t - k\left(z + \frac{x^2+y^2}{2R(z)}\right) + \phi_G(z)\right) - \Gamma_g\left(t - \frac{z}{c}\right)^2\right] \right\}. \quad (19)$$

⁶Řešení (16) je pouze nejjednodušší z celé třídy řešení, které můžeme dostat zavedením funkce

$$\mathcal{E}_H(\mathbf{r}) = f_1\left(\frac{x}{w(z)}\right) f_2\left(\frac{y}{w(z)}\right) e^{i\tilde{\phi}(z)} \mathcal{E}_0(\mathbf{r}), \quad (14)$$

kde f_1 , f_2 a $\tilde{\phi}$ jsou nové neznámé funkce. Podobným postupem, který jsme provedli při odvození \mathcal{E}_0 , lze ukázat, že výsledkem je

$$\mathcal{E}_{H_{nm}}(\mathbf{r}) = C_{nm} H_n\left(\frac{\sqrt{2}x}{w(z)}\right) H_m\left(\frac{\sqrt{2}y}{w(z)}\right) e^{-i(n+m)\phi_G(z)} \mathcal{E}_0(\mathbf{r}), \quad (15)$$

C_{nm} jsou konstanty a $H_\ell(\xi)$, $\ell \in \mathbb{Z}_+$, jsou Hermitovy polynomy. Výsledné průběhy intenzity v závislosti na prostorových souřadnicích mají pak zajímavé geometrické tvary. V této práci však nebudeme tato řešení potřebovat, podrobnosti lze nalézt například v [22, 34].

2.4 Určení amplitudy elektrického pole \mathcal{E}_0 pomocí intenzity dopadajícího záření

Zatím jsme ve všech úvahách pracovali pouze s elektrickým polem, které je vhodné pro teoretické výpočty, nicméně v praxi se mnohem lépe měří intenzita dopadajícího záření. Intenzita dopadajícího záření je energie, která projde jednotkovou plochou za jednotku času a je dána Poyntingovým vektorem (ve vakuu) $\mathbf{s} = (\mathbf{E} \times \mathbf{B})/\mu_0$, \mathbf{B} je vektor magnetické indukce a pro rovinou vlnu (1) je

$$B_y(\mathbf{r}, t) = \frac{\mathcal{E}}{c} \cos(\omega_0 t - kz + \varphi), \quad B_x(\mathbf{r}, t) = B_z(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (20)$$

Okamžitá intenzita je dána jako velikost Poyntingova vektoru, ale měřením jsme schopni určit střední hodnotu, proto pro pevné z je

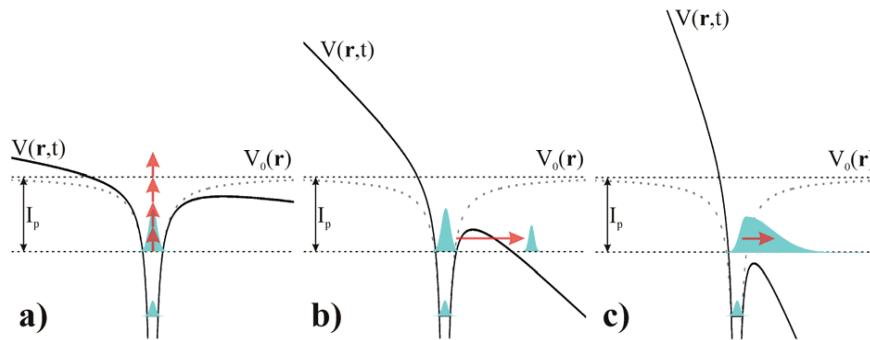
$$I = \langle \|\mathbf{s}\| \rangle_{T_0} = \frac{1}{T_0} \int_0^{T_0} \frac{\mathcal{E}^2}{\mu_0 c} \cos^2(\omega_0 t + \tilde{\varphi}) dt = \frac{1}{2} \varepsilon_0 c \mathcal{E}^2, \quad T_0 = \frac{2\pi}{\omega_0}, \quad (21)$$

využili jsme ortogonalitu \mathbf{E} a \mathbf{B} , integrálu $\int_0^{2\pi} \cos^2(\xi) d\xi = \pi$ a vztahu $\varepsilon_0 \mu_0 = 1/c^2$. Nás tato veličina zajímá pro (18), tento vztah se liší pouze v proměnné obálce a prostorovém rozložení. Za intenzitu laseru budeme považovat intenzitu v ohnisku, při maximu obálky. Odtud určíme amplitudu elektrického pole budícího pulzu

$$\mathcal{E}_0 = \sqrt{\frac{2I}{\varepsilon_0 c}}. \quad (22)$$

3 Teorie generace vysokých harmonických frekvencí: jednoatomová odezva

3.1 Režimy ionizace silným elektromagnetickým polem



Obrázek 9: Režimy ionizace silným optickým polem: a) značí multifotonová ionizace, b) tunelový režim, c) ionizace nad bariérou. $V_0(r)$ značí původní neporušený potenciál a $V(r, t)$ potenciál porušený vnějším polem. Převzato z [32].

Současný model ionizace nízkofrekvenčním optickým polem rozlišuje tři různé režimy ionizace podle toho, jak je silné budící pole.⁷ První režim se nazývá *multifotonová ionizace* a nastává pokud není Coulombický potenciál mateřského atomu příliš narušen a je tedy třeba absorpcí více fotonů pole k překonání této bariéry. Druhý je *tunelový režim*, kdy je potenciál silně narušen, nicméně ne natolik, aby byl elektron schopen překonat bariéru klasickým způsobem. K vysvětlení ionizace v tomto případě je třeba použít tunelového jevu. Poslední je *ionizace nad bariérou* a dochází k ní, pokud je Coulombický potenciál zcela potlačen a elektron může volně opustit atom. Tyto tři režimy jsou schematicky naznačeny na obrázku 9. Pro to, abychom rozhodli, který z těchto režimů převládá slouží *Keldyshův parametr*

$$\gamma_K = \sqrt{\frac{I_P}{2U_p}}, \quad (23)$$

I_P je ionizační potenciál atomu plynu a U_p je *ponderomotivní potenciál*, který nám udává „sílu“ budícího pulzu a závisí jednak na intenzitě pulzu a také vlnové délce budícího laseru. Přesný tvar bude uveden později (33). Pro $\gamma_K \gg 1$ převládá multifotonová ionizace a pro $\gamma_K \ll 1$ tunelový režim, případně ionizace nad bariérou. Pro hodnoty $\gamma_K \approx 1$ nastává kombinace obou procesů a matematický popis tohoto případu je velmi náročný. Přesným zdůvodněním tohoto vztahu se nebudeme zabývat a lze nalézt v [1]. Vzhledem k intenzitě a trvání uvažovaných pulzů se v této práci pohybujeme v druhém a třetím režimu. Nakonec uvedeme, že Keldyshův parametr je primárním způsobem rozlišení mezi jednotlivými režimy, ale roli zde hrají i délky budících pulzů.

3.2 Tříkrokový model

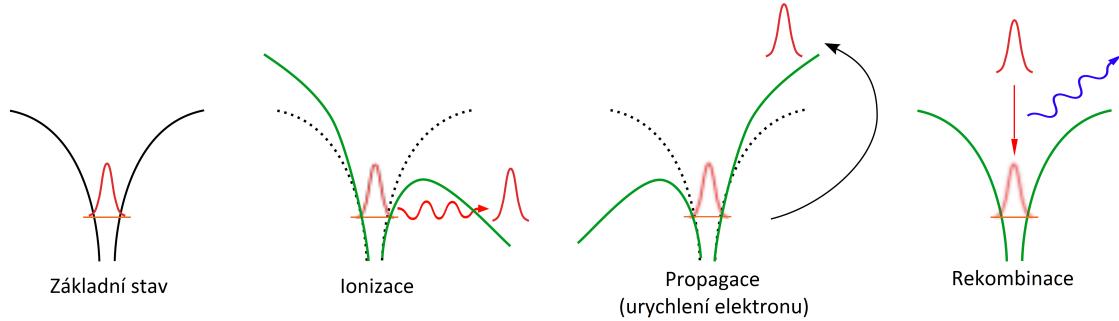
Tento intuitivní model nám umožní získat představu, co se děje s elektronami v obalu zkoumaného atomu plynu a jeho výsledkem je teoretický výpočet charakteristiky vzniklého záření. Nyní si tento model intuitivně představíme a později ho formalizujeme pomocí pohledu klasické fyziky⁸ a dále zobecníme kvantověmechanickým modelem.⁹ Před začátkem interakce předpokládáme, že se elektron nachází v elektronovém obalu atomu ve stavu $|\psi\rangle$. První fází interakce vedoucí ke generaci

⁷Uvedeme běžně používané anglické termíny: multifotonová ionizace–multiphoton ionization (MPI), tunelový režim–tunnel regime, ionizace nad bariérou–above threshold ionization (ATI).

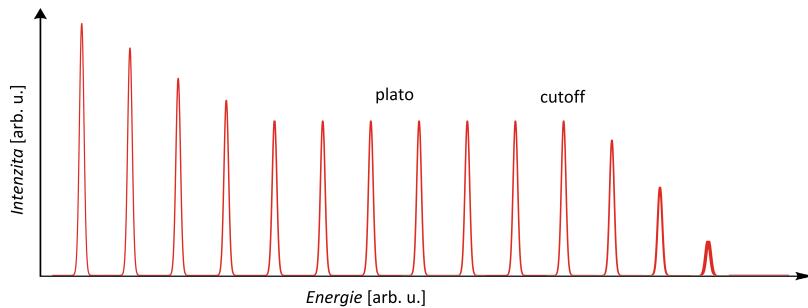
⁸Poprvé s tímto modelem přišel Paul B. Corkum ve článku [11] v roce 1993.

⁹Tento popis provedl Maciej Lewenstein [12] rok po zveřejnění klasického modelu.

vysokých harmonických frekvencí je *ionizace*, v této fázi je elektron uvolněn vlivem vnějšího pole do kontinua. Druhá fáze se nazývá *propagace* a pohyb nyní volného elektromu je během ní určen vnějším elektromagnetickým polem a polem mateřského atomu. Poslední fáze je *rekombinace*, kdy vlivem periodicity vnějšího pole elektron může rekombinovat s mateřským atomem za vyzáření vysokoenergetického fotonu, jak se později ukáže, je právě tento foton základem vznikajícího attosekundového impulzu. Tento proces je znázorněn na obrázku 10. Nyní se podívejme co má být naším výsledkem, je to průběh elektrického pole, které vznikne při tomto procesu a jeho výsledné spektrum. Předpokládejme harmonické budící pole, popisovaný proces tedy bude probíhat periodicky s periodou budícího pole, navíc bude v druhé půlperiodě probíhat stejný proces, pouze elektron bude uvolněn v opačném směru a tedy i vzniklé pole bude mít opačné znaménko, z této úvahy plyne, že ve výsledném spektru budou pouze liché harmonické frekvence.¹⁰ Dále očekáváme, že energie, kterou může elektron během pohybu získat, je omezená a proto bude i maximální možná energie vzniklého fotonu omezená a ve spektru se to projeví tzv. *cutoffem*, což znamená, že vyšší energie již nebudou ve spektru zastoupeny. Příklad vzniklého spektra je na obrázku 11. V tomto spektru vidíme pokles v oblasti nízkých harmonických, který je následován *platem*, které je ukončeno cutoffem. Existenci plata budeme považovat za fenomenologickou záležitost.



Obrázek 10: Schéma tříkrokového modelu. Elektron je značen jako červený vlnový balík, narušený potenciál atomu zeleně a vzniklý foton modře. Převzato z [31].



Obrázek 11: Spektrum záření vzniklého při generaci vysokých harmonických frekvencí v plynu. Převzato z [31], upraveno.

¹⁰Vzniklé elektrické pole bude na základě této úvahy funkci splňující $f(x) = f(x+2\pi)$ a $f(x) = -f(x+\pi)$, (perioda je bez újmy na obecnosti zvolena 2π), tuto funkci můžeme rozvést do Fourierovy řady v bázi $\{\exp(ikx)\}_{k=-\infty}^{+\infty}$, pro jejíž koeficienty platí

$$a_k = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-ikt} f(t) dt = \frac{1}{2\pi} \left(\int_0^{\pi} e^{-ikt} f(t) dt + e^{-ik\pi} \int_0^{\pi} e^{-iks} f(s+\pi) ds \right) = \frac{(1 - e^{-ik\pi})}{2\pi} \int_0^{\pi} e^{-kt} f(t) dt, \quad (24)$$

tento výraz je nulový pro sudá k . Proto budou ve Fourierově rozvoji funkce f zastoupeny pouze členy s lichým k .

3.3 Klasické přiblížení tříkrokového modelu

Nyní je třeba vytvořit matematický popis tohoto procesu. Umístíme zkoumaný atom do počátku souřadnic a zvolíme harmonický tvar vnějšího pole

$$\mathcal{E}_L = (\mathcal{E}_L \cos(\omega_0 t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), 0, 0), \quad (25)$$

odpovídající vektorový potenciál je

$$\mathbf{A}_L = \left(-\frac{\mathcal{E}_L}{\omega_0} \sin(\omega_0 t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), 0, 0 \right). \quad (26)$$

Sestavíme Hamiltonián popisující elektron uvolněný z atomu

$$H = \frac{(\mathbf{p}_c + e\mathbf{A}_L)^2}{2m_e} + V_C(\mathbf{r}), \quad (27)$$

$V_C(\mathbf{r})$ je Coulombický potenciál atomu, \mathbf{p}_c je kanonická hybnost elektronu určená vztahem

$$\mathbf{p}_c = m_e \mathbf{v} - e \mathbf{A}_L. \quad (28)$$

Z této volby Hamiltioniánu plyne, že jádro atomu považujeme za statické. Předpokládáme, že pole budícího laseru je podstatně větší než Coulombické pole atomu, proto provedeme approximaci $V_C = 0$. Dále zanedbáme vliv magnetické složky pole, což je relativistický efekt prvního řádu – $\|\mathbf{B}\| = \frac{1}{c} \|\mathcal{E}\|$. To znamená, že tento popis není dobrý pro relativistické intenzity budícího pole.¹¹ Po tomto zjednodušení

$$H = \frac{(\mathbf{p}_c + e\tilde{\mathbf{A}})^2}{2m_e}, \quad \tilde{\mathbf{A}} = \left(-\frac{\mathcal{E}_0}{\omega_0} \sin(\omega_0 t), 0, 0 \right). \quad (29)$$

Odtud již můžeme nalézt řešení Hamiltonových rovnic, zajímá nás pouze pohyb ve směru osy x ,

$$\dot{(p_c)_x} = 0, \quad \dot{x} = \frac{(p_c)_x - \frac{e\mathcal{E}_0}{\omega_0} \sin(\omega_0 t)}{m_e}, \quad (30)$$

odtud dostaneme přímo rovnici pro pohyb elektronu

$$m_e \ddot{x} = -e\mathcal{E}_0 \cos(\omega_0 t), \quad \dot{x}|_{t'} = 0, \quad x|_{t'} = 0, \quad (31)$$

t' značí čas uvolnění elektronu. Počáteční podmínky jsou další zjednodušení, ve skutečnosti se uvolněný elektron objeví v jisté vzdálenosti od atomu, nicméně tento tvar řešení nám umožní provést další úvahy o pohybu. Řešení je

$$x(t) = \frac{e\mathcal{E}_0}{m_e \omega_0^2} [(\cos(\omega_0 t) - \cos(\omega_0 t')) + \omega_0 \sin(\omega_0 t')(t - t')]. \quad (32)$$

Nyní se pokusíme na základě tohoto předpisu získat maximální energii fotonu, vzniklého při rekombinaci, kterou můžeme získat. Položíme do rovnosti energii vzniklého fotonu E_γ , kinetickou energii, kterou získá elektron během pohybu, a ionizační potenciál atomu I_P , který odpovídá energii základního stavu atomu. Dostáváme

$$E_\gamma(t', t'') = \hbar\omega_\gamma = I_P + \frac{m_e \dot{x}^2}{2} \Big|_{t''} = I_P + 2U_p(\sin(\omega_0 t'') - \sin(\omega_0 t'))^2, \quad U_p = \frac{1}{m_e} \left(\frac{e\mathcal{E}_0}{2\omega_0} \right)^2, \quad (33)$$

t'' značí čas rekombinace elektronu a opět předpokládáme $x(t'') = 0$, zavedli jsme ponderomotivní potenciál U_p . Nyní potřebujeme nalézt extrém této funkce. K tomu, aby se nám to podařilo,

¹¹Magnetická složka budícího pole způsobuje pohyb elektronu ve směru jejího šíření, což zabraňuje návratu elektronu k mateřskému atomu a následné rekombinaci, proto není vhodné používat ke generaci vysokých harmonických, případně jednotlivých attosekundových impulzů, budící pole s takovou intenzitou, že není tento efekt zanedbatelný.

je třeba vyřešit rovnici $x(t) = 0$ (a najít tak čas rekombinace $t'' = t''(t')$), což bohužel kromě triviálního řešení t' analyticky neumíme. Nicméně je možné nalézt přibližné analytické řešení, které tuto závislost dobře popisuje [1]. Tato závislost je

$$t'' = \frac{\pi}{2\omega_0} - \frac{3}{\omega_0} \arcsin \left(\frac{2\omega_0}{\pi} t' - 1 \right), \quad (34)$$

toto řešení můžeme dosadit do členu představujícím kinetickou energii v rovnici (33) a následně nalézt její extrém. Řešíme rovnici

$$\frac{dE_k}{dt'} = 2U_p \frac{d}{dt'} \left\{ \cos \left[3 \arcsin \left(\frac{2\omega_0}{\pi} t' - 1 \right) \right] - \sin(\omega_0 t') \right\}^2 = 0. \quad (35)$$

Jejím vyřešením a dosazením do vztahu (33) získáme maximální možnou energii fotonu, kterou lze získat¹²

$$E_{\gamma,\max} \approx I_P + 3.17 \cdot U_p, \quad \text{pro} \quad \omega_0 t' \approx 0.05 \cdot 2\pi, \quad \omega_0 t'' \approx 0.7 \cdot 2\pi. \quad (36)$$

Tento výsledek nám tedy dává odpověď na polohu cutoffu ve výsledném spektru. Dalším důsledkem toho, že funkce má maximum pro t' je, že pro jiné energie než je maximální existují dva různé časy uvolnění elektronu vedoucí k této energii. Proto se pro tyto návratové energie mluví o tzv. *krátkých trajektoriích* pro časy uvolnění elektronu $t' > t'_{E_{\gamma,\max}}$ a *dlouhých trajektoriích* pro $t' < t'_{E_{\gamma,\max}}$.

3.4 Kvantový popis approximací silného pole (SFA)¹³

V tomto odstavci se budeme zabývat vyřešením celého modelu interakce, jehož klasický popis jsme představili v minulém oddíle, pomocí aparátu kvantové mechaniky. V řešení tohoto problému je obvyklé používat atomové jednotky a tak se této konvence budeme držet i v této práci, přehled atomových jednotek je uveden v dodatku B. Myšlenka této approximace vychází z klasického popisu elektromagnetického pole a kvantového popisu interagujícího elektronu. Řešení si představíme pro vodíkový atom. Vznikající pole popíšeme pomocí dipólového záření a dipólový moment určíme jako druhou derivaci střední hodnoty polohy.

3.4.1 Záření pohybujícího se náboje

Představme si výsledky klasické fyziky pro záření dipolu. Záření dipolu v bodě o polohovém vektoru \mathbf{r}' je dáné pro velké $\|\mathbf{r}'\| =: r'$ vztahy [28]

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}', t) = \frac{\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \ddot{\mathbf{d}}) - \ddot{\mathbf{d}}}{4\pi\epsilon_0 c^2 r'} \Bigg|_{t-\frac{r'}{c}}, \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}', t) = -\frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{n} \times \ddot{\mathbf{d}}}{cr'} \Bigg|_{t-\frac{r'}{c}}, \quad (37)$$

kde $\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}'}{r'}$ a $\mathbf{d}(t)$ přestavuje proměnný dipól, v našem případě $\mathbf{d}(t) = -er(t)$, kde \mathbf{r} značí polohu elektronu. Zvolíme směr šíření pulzu totožný se směrem osy z a směr vektoru elektrického pole s osou x . Stačí určit pouze elektrické pole, protože víme, že generovaná vlna je elektrickým polem plně určena. Zabýváme se pouze jednodimensionálním modelem, proto nám stačí určit elektrické pole na ose z . Výsledný vztah pro elektrické pole generované dipólovým zářičem je

$$\mathcal{E}_x(z, t) = \frac{\ddot{d}_x (t - \frac{z}{c})}{4\pi\epsilon_0 c^2 z}. \quad (38)$$

Ve zbytku této kapitoly se budeme zabývat určením zrychlení dipolu $\ddot{\mathbf{d}}$, který je způsoben zrychleným pohybem elektronu v budícím poli laseru, což je jediná věc, kterou musíme spočítat do tohoto vztahu.

¹²Tento vztah lze odvodit i pomocí kvantové teorie s výsledkem $E_{\gamma,\max} \doteq 3.17 \cdot U_p + I_P F(I_P/U_p)$, kde F je funkce, která nabývá hodnoty 1.3 pro $I_P \ll U_p$ a klesá k 1 s rostoucím I_P , toto odvození není pro naše účely podstatné a lze ho nalézt v [12].

¹³V angličtině se používá výraz *Strong field approximation*, zkráceně SFA, tuto zkratku budeme používat i my.

3.4.2 Kvantový popis interakce elektronu s budícím polem

Pohyb elektronu bude popsán stejným Hamiltoniánem, jako v klasickém případě, Hamiltonův operátor má tedy tvar

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} + \hat{V}_C(\mathbf{r}) + \mathcal{E}(t) \cdot \hat{\mathbf{r}}, \quad (39)$$

pro naše řešení je výhodné používat Hamiltonián v tomto tvaru, který se formálně liší od (29), ale popisuje stejný systém. Časová Schrödingerova rovnice je

$$\mathbf{i}\partial_t |\psi\rangle = \left(-\frac{\Delta}{2} + \hat{V}_C(\mathbf{r}) + \mathcal{E}(t) \cdot \hat{\mathbf{r}} \right) |\psi\rangle. \quad (40)$$

Vyřešením této rovnice bychom získali veškerou informaci, kterou v tomto modelu potřebujeme. Bohužel tuto rovnici neumíme přímo vyřešit. Nicméně za jistých předpokladů můžeme nalézt přiblížení řešení. Umíme vyřešit úlohu pro systém bez působení pole, tj. popsanou Hamiltoniánem $\hat{H}_C = -\Delta/2 + \hat{V}_C(\mathbf{r})$, tj. nabité částice v Coulombickém poli, pro tento Hamiltonián umíme nalézt ortonormální bázi z vlastních funkcí $\{|n\rangle\}_{n=0}^{+\infty}$, splňující $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$. Pro vlastní stavu umíme vyřešit i časovou Schrödingerovu rovnici s počáteční podmínkou, jejím řešením je [4]

$$|\psi_C(t)\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \alpha_n e^{-iE_n t} |n\rangle, \quad |\psi_C(0)\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} \alpha_n |n\rangle. \quad (41)$$

kde $|\psi_C(0)\rangle$ je rozvoj stavové funkce do báze z vlastních funkcí Hamiltoniánu s koeficienty α_n . Druhý systém, jehož řešení známe, je volná částice popsaná Hamiltoniánem $\hat{H}_F = -\Delta/2$. Toto řešení má tvar rovinné vlny

$$|\psi_F(t)\rangle = e^{-i(\omega_e t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} = e^{-i\omega_e t} |\mathbf{p}\rangle. \quad (42)$$

Nyní se pokusíme z těchto řešení určit tvar výsledného řešení systému popsaného (40), lineární kombinací funkcí $|\psi_C\rangle$ a $|\psi_F\rangle$ ve tvaru

$$|\psi(\mathbf{r}, t)\rangle = a(t) |\psi_C(\mathbf{r}, t)\rangle + \int_{\mathbb{R}^3} b(\mathbf{p}, t) e^{-i(\omega_e t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})} d^3p, \quad (43)$$

dále učiníme předpoklad, že pole je dostatečně silné a uvolní elektron přímo do kontinua, tudíž uvažujeme pouze základní stav $|\psi_C\rangle = |0\rangle$. Po vhodném přenásobení funkce b , tak můžeme odhad našeho řešení psát

$$|\psi(\mathbf{r}, t)\rangle = e^{iI_P t} \left(a(t) |0\rangle + \int_{\mathbb{R}^3} b(\mathbf{p}, t) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d^3p \right) = e^{iI_P t} \left(a(t) |0\rangle + \int_{\mathbb{R}^3} b(\mathbf{p}, t) |\mathbf{p}\rangle d^3p \right), \quad (44)$$

využili jsme rovnosti $E_0 = -I_P$. Člen $a(t)$ značí obsazení základního stavu a předpokládáme malou změnu populace základního stavu během celého procesu, tj. $a(t) \approx 1$. Funkci b získáme dosazením odhadu řešení do (40). Bez újmy na obecnosti se omezíme na pohyb ve směru osy x . Pro levou stranu rovnice dostaneme

$$\mathbf{i}\partial_t |\psi\rangle = e^{iI_P t} \left(-I_P |0\rangle - I_P \int_{\mathbb{R}^3} b e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d^3p + \mathbf{i} \int_{\mathbb{R}^3} \dot{b} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d^3p \right), \quad (45)$$

pro pravou stranu rovnice

$$\hat{H} |\psi\rangle = e^{iI_P t} \left[\left(-\frac{\Delta}{2} + \hat{V}_C \right) |0\rangle + \left(-\frac{\Delta}{2} + \hat{V}_C \right) \int_{\mathbb{R}^3} b e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d^3p - \mathcal{E}_x \hat{x} \left(|0\rangle + \int_{\mathbb{R}^3} b e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d^3p \right) \right], \quad (46)$$

využili jsme toho, že jediná nenulová složka elektrického pole je \mathcal{E}_x . Nyní je výhodné využít řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice $(-\Delta/2 + \hat{V}_C)|0\rangle = -I_P|0\rangle$, dostaneme

$$\hat{H}|\psi\rangle = e^{iI_P t} \left[-I_P|0\rangle + \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} + \hat{V}_C \right) b|\mathbf{p}\rangle d^3p - \mathcal{E}_x \hat{x}|0\rangle - \mathcal{E}_x \hat{x} \int_{\mathbb{R}^3} b e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} d^3p \right]. \quad (47)$$

Zaměřme se na poslední výraz, pomocí jednoduchých úprav s pomocí per partes a tvaru operátoru \hat{x} dostaneme

$$\mathcal{E}_x \hat{x} \int_{\mathbb{R}^3} b e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} d^3p = \mathcal{E}_x \int_{\mathbb{R}^3} b x e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} d^3p = -i\mathcal{E}_x \int_{\mathbb{R}^3} b (\partial_{p_x} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}) d^3p = i\mathcal{E}_x \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial b}{\partial p_x} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} d^3p, \quad (48)$$

při výpočtu per partes jsme využili $b(\|\mathbf{p}\| \rightarrow +\infty) \rightarrow 0$. Dostaneme tak

$$\hat{H}|\psi\rangle = e^{iI_P t} \left[-I_P|0\rangle + \int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} + \hat{V}_C \right) b|\mathbf{p}\rangle d^3p - \mathcal{E}_x \hat{x}|0\rangle - i\mathcal{E}_x \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial b}{\partial p_x} |\mathbf{p}\rangle d^3p \right]. \quad (49)$$

Nyní můžeme porovnat výrazy (49) a (45) a celou rovnost vynásobíme libovolným kovektorem $\langle \mathbf{p}' |$, využijeme normalizaci vlastních vektorů hybnosti k δ -funkci: $\langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})$, dostaneme

$$\begin{aligned} i \int_{\mathbb{R}^3} \dot{b} \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) d^3p - I_P \int_{\mathbb{R}^3} b \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) d^3p = \\ = -\mathcal{E}_x \langle \mathbf{p}' | \hat{x} | 0 \rangle + \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathbf{p}'^2}{2} b \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) d^3p + \int_{\mathbb{R}^3} b \langle \mathbf{p}' | \hat{V}_C | \mathbf{p} \rangle d^3p - i\mathcal{E}_x \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\partial b}{\partial p_x} \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) d^3p. \end{aligned} \quad (50)$$

Zajímá nás vývoj funkce b v průběhu pohybu, kdy je elektron vzdálen od iontu, proto zanedbáme Coulombický potenciál ($\hat{V}_C \doteq 0$), dále předpokládáme, že příspěvek členu $\partial_{p_x} b$ je zanedbatelný vůči ostatním, to znamená, že funkce b se mění podstatně rychleji s časem než se souřadnicí v hybnostním prostoru, tedy předpokládáme $|\partial_{p_x} b| \ll |\partial_t b|$. Rovnici se nachází výraz typu $\langle \mathbf{p} | \hat{r} | 0 \rangle$, tyto skalární součiny se nazývají *maticové elementy dipólového přechodu*, budeme je značit \tilde{d} a jsou pro ně známý funkční předpisy. Například pro atom vodíku v základním stavu, který uvažujeme, je [1]

$$\tilde{d}_{1s} = i \frac{8\sqrt{2}}{\pi} \frac{\mathbf{p}}{(1 + \mathbf{p}^2)^3}. \quad (51)$$

Nyní provedeme všechny naznačené integrály a zmíněné zanedbání v rovnici (50) a formálně přeznačíme $\mathbf{p}' \rightarrow \mathbf{p}$. Dostaneme tak následující rovnici

$$\frac{\partial b}{\partial t}(\mathbf{p}, t) + i \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2} + I_P \right) b(\mathbf{p}, t) = i\mathcal{E}_x(t) \tilde{d}_x(\mathbf{p}). \quad (52)$$

Hybnost \mathbf{p} , ale také závisí na čase, proto je $\mathbf{p} = \mathbf{p}(t)$, (parciální derivaci podle t pak chápeme jako derivaci vztaženou k druhé proměnné funkce b). Rovnici (52) můžeme řešit vzhledem k proměnné t se zavedením funkcí

$$g(t) = i \left(\frac{(\mathbf{p}(t))^2}{2} + I_P \right), \quad h(t) = i\mathcal{E}_x(t) \tilde{d}_x(\mathbf{p}(t)). \quad (53)$$

Rovnice tak dostane tvar

$$\frac{\partial b}{\partial t}(\mathbf{p}(t), t) + g(t)b(t) = h(t), \quad (54)$$

jedná se o lineární diferenciální rovnici prvního řádu s pravou stranou, k jejímu vyřešení potřebujeme jednu počáteční podmítku. Tu získáme z úvahy, že před příchodem budího pulzu byl atom v základním stavu, to znamená $b(t \rightarrow -\infty) = 0$. Řešíme tedy

$$\dot{b}(t) + g(t)b(t) = h(t), \quad b(-\infty) = 0. \quad (55)$$

Podle teorie obyčejných diferenciálních rovnic je řešení

$$b(t) = e^{-\int_{-\infty}^t g(t_2) dt_2} \int_{-\infty}^t h(t_1) e^{\int_{t_1}^t g(t_2) dt_2} dt_1. \quad (56)$$

Po přejítí k původním funkcím a jednoduché úpravě je výsledek

$$b(\mathbf{p}(t), t) = \mathbf{i} \int_{-\infty}^t \mathcal{E}_x(t_1) \tilde{d}_x(\mathbf{p}(t_1)) e^{-\mathbf{i} \int_{t_1}^t \left(\frac{(\mathbf{p}(t_2))^2}{2} + I_P \right) dt_2} dt_1. \quad (57)$$

Tento výsledek ještě musíme dále upravit, především jsme ztratili přímou závislost na $\mathbf{p}(t)$ a víme tuto závislost pouze na vývoji hybnosti během pohybu před časem t . Toto nás omezuje v provedení integrálu v (43).

3.4.3 Časový vývoj hybnosti

Potřebujeme upravit vztah (57), abychom v něm získali závislost na okamžité hybnosti $\mathbf{p}(t)$. Vodítkem k tomu je nám klasické řešení Hamiltonovy rovnice (29). Při pohybu elektronu v elektromagnetickém poli, popsaném tímto Hamiltoniánem se zachovává kanonická hybnost (28)

$$\mathbf{p}_c = \mathbf{p} - \mathbf{A} \quad (58)$$

(v atomových jednotkách $e = 1$). Takže pro libovolné dva časy t_1 a t_2 platí

$$\mathbf{p}_c = \mathbf{p}(t_1) - \mathbf{A}(t_1) = \mathbf{p}(t_2) - \mathbf{A}(t_2) \Rightarrow \mathbf{p}(t_1) = \mathbf{p}(t_2) - \mathbf{A}(t_2) + \mathbf{A}(t_1) = \mathbf{p}_c + \mathbf{A}(t_1). \quad (59)$$

Rádi bychom tento výsledek použili do našeho kvantového výpočtu, Hamiltonián se kterým pracujeme není v kanonickém tvaru, nicméně popisuje stejnou úlohu, pokud budeme popisovat elektrické pole pomocí $\mathcal{E} = -\partial_t \mathbf{A}$. Vzhledem ke klasickému řešení definujeme operátor kanonické hybnosti $\hat{\mathbf{p}}_c := \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{A}}(t)$, $\hat{\mathbf{A}}(t) = \mathbf{A}(t)$ a ověříme, že tento operátor je integrálem pohybu i v kvantovém případě, ověření provedeme pro Hamiltonián (39), v průběhu pohybu opět zanedbáme Coulombickou interakci, dostáváme tak

$$\hat{H}_{\mathcal{E}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}(t) \cdot \hat{\mathbf{r}}. \quad (60)$$

Ověříme, že je $\hat{\mathbf{p}}_c$ integrálem pohybu

$$\frac{d(\hat{\mathbf{p}}_c)_x}{dt} = \frac{1}{\mathbf{i}} [\hat{p}_x - A_x, \hat{H}_{\mathcal{E}}] + \partial_t (\hat{p}_x - A_x) = \partial_t A_x - \partial_t A_x = 0. \quad (61)$$

Použili jsme $[\hat{x}, \hat{p}_x] = \mathbf{i}$. Kanonická hybnost je tedy skutečně integrálem pohybu. Pomocí této úvahy můžeme upravit integrál v exponenciele, zavedením funkce¹⁴

$$\mathcal{S}(t_A, t_B) = \int_{t_A}^{t_B} \left(\frac{1}{2} (\mathbf{p}_c + \mathbf{A}(t))^2 + I_P \right) dt. \quad (62)$$

Tímto jsme problém časového vývoje hybnosti převedli na časový vývoj vektorového potenciálu budícího pole, který známe. Řešení (57) můžeme potom psát ve tvaru

$$b(\mathbf{p}(t), t) = \mathbf{i} \int_{-\infty}^t \mathcal{E}_x(\tilde{t}) \tilde{d}_x(\mathbf{p}_c + \mathbf{A}(\tilde{t})) e^{-\mathbf{i} \mathcal{S}(\tilde{t}, t, \mathbf{p}_c + \mathbf{A}(t_S))} d\tilde{t} \quad (63)$$

a \mathbf{p}_c můžeme spočítat v libovolném čase. Naším úkolem bylo získat b v závislosti na $\mathbf{p} = \mathbf{p}(t)$, abychom přes hybnost mohli zintegrovat výsledek, díky kanonické hybnosti, můžeme psát

$$b(\mathbf{p}, t) = \mathbf{i} \int_{-\infty}^t \mathcal{E}_x(t_1) \tilde{d}_x(\mathbf{p} - \mathbf{A}(t) + \mathbf{A}(t_1)) e^{-\mathbf{i} \int_{t_1}^t \left(\frac{1}{2} (\mathbf{p} - \mathbf{A}(t) + \mathbf{A}(t_2))^2 + I_P \right) dt_2} dt_1. \quad (64)$$

¹⁴ \mathcal{S} úzce souvisí s klasickou akcí elektronu, v literatuře se často nazývá kvaziklasickou akcí [1, 12]. Je ale třeba zmínit, že díky našim aproximacím se nejedná o akci žádného Lagrangeánu, který by odpovídal Hamiltoniánům, se kterými pracujeme. Počítáme s tím, že elektron překonal Coulombickou bariéru, která je reprezentována konstantou I_P a člen $\frac{1}{2}(\mathbf{p}_c + \mathbf{A}(t))^2 = \frac{1}{2}\mathbf{p}^2$ odpovídá akci Lagrangeánu volné částice bez započítání působení budícího pole, ačkoliv toto pole v našem postupu zanedbané není.

3.4.4 Střední hodnota polohy elektronu

Nyní můžeme přistoupit k výpočtu výsledné střední hodnoty polohy, která nás zajímá. Protože je vlastní funkce na začátku pohybu normovaná, je poloha

$$\mathbf{r}(t) \approx \langle \mathbf{r} \rangle_{|\psi(t)\rangle} = \langle \psi(t) | \hat{\mathbf{r}} | \psi(t) \rangle. \quad (65)$$

Dosazením z (64) a (43) do (65) dostaneme

$$\begin{aligned} \mathbf{r}(t) \approx & |a(t)|^2 \langle 0 | \hat{\mathbf{r}} | 0 \rangle + \int_{\mathbb{R}^3} \overline{a(t)} b(\mathbf{p}, t) \langle 0 | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{p} \rangle d^3 p + \int_{\mathbb{R}^3} a(t) \overline{b(\mathbf{p}, t)} \langle \mathbf{p} | \hat{\mathbf{r}} | 0 \rangle d^3 p + \\ & + \int_{\mathbb{R}^6} b(\mathbf{p}, t) \overline{b(\mathbf{p}', t)} \langle \mathbf{p}' | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{p} \rangle d^3 p d^3 p', \end{aligned} \quad (66)$$

první člen na pravé straně rovnosti je nulový, což lze zjistit jednoduše explicitním výpočtem.¹⁵ Naším cílem je provést praktický výpočet, musíme proto provést další zjednodušení. Podívejme se detailněji na vztah (66) a pokusme se ho interpretovat. První člen na pravé straně znamená příspěvek od elektronů, které neopustily základní stav, poslední člen naopak značí elektrony, které nerekombinovaly zpět k mateřskému atomu. Pro generaci vysokých harmonických nás tedy zajímají výhradně prostřední dva členy, o prvním členu víme, že je nulový a poslední zanedbáme. Navíc stejně jako v odvození vztahu pro b předpokládáme $a(t) \approx 1$. Dále si povšimněme, že prostřední dva členy jsou k sobě vzájemně komplexně sdružené, můžeme tedy psát¹⁶

$$\mathbf{r}(t) \approx 2\text{Im} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{-\infty}^t \tilde{\mathbf{d}}(\mathbf{p}) \cdot \left(\mathcal{E}(t_1) \cdot \overline{\tilde{\mathbf{d}}(\mathbf{p} - \mathbf{A}(t) + \mathbf{A}(t_1))} \right) e^{i \int_{t_1}^t (\frac{1}{2}(\mathbf{p} - \mathbf{A}(t) + \mathbf{A}(t_2))^2 + I_P) dt_2} dt_1 d^3 p, \quad (67)$$

zaměníme pořadí integrování a ve vnitřním integrálu provedeme substituci $\mathbf{p} - \mathbf{A}(t) = \mathbf{p}_c$, tato substituce má i fyzikální interpretaci přechodu ke kanonické hybnosti. Dostaneme tak finální výraz

$$\mathbf{r}(t) \approx 2\text{Im} \int_{-\infty}^t \int_{\mathbb{R}^3} \tilde{\mathbf{d}}(\mathbf{p}_c + \mathbf{A}(t)) \cdot \left(\mathcal{E}(t_1) \cdot \overline{\tilde{\mathbf{d}}(\mathbf{p}_c + \mathbf{A}(t_1))} \right) e^{i \int_{t_1}^t (\frac{1}{2}(\mathbf{p}_c + \mathbf{A}(t_2))^2 + I_P) dt_2} d^3 p_c dt_1. \quad (68)$$

3.4.5 Aproximace sedlového bodu

Výraz (68) je pro praktický výpočet stále příliš složitý. Pro jeho výpočet použijeme approximaci sedlového bodu - *Saddle point approximation*. Tato metoda výpočtu integrálů typu $\int_{\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{\xi}) e^{i\zeta g(\boldsymbol{\xi})} d^n \boldsymbol{\xi}$ je představena v dodatku A. Podle tohoto postupu je

$$\int_{\mathbb{R}^n} f(\boldsymbol{\xi}) e^{i\zeta g(\boldsymbol{\xi})} d^n \boldsymbol{\xi} \approx \frac{f(\boldsymbol{\xi}_0)}{\zeta^{\frac{n}{2}}} e^{i\zeta g(\boldsymbol{\xi}_0)} \prod_{i=1}^n \sqrt{\frac{2\pi i}{a_i}}, \quad (69)$$

¹⁵ $\langle 0 | \hat{x} | 0 \rangle = \frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{R}^3} x e^{-2r} dx dy dz = \frac{1}{\pi} \left(\int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi \right) \left(\int_0^\pi \sin^2 \theta d\theta \right) \left(\int_0^{+\infty} r^3 e^{-2r} dr \right) = 0$, výraz je nulový protože $\int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi = 0$ a ostatní výrazy jsou konečné. Ve výpočtu jsme použili sférickou transformaci

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \varphi \\ y &= r \sin \theta \sin \varphi, \\ z &= r \cos \theta \end{aligned}$$

$(r, \theta, \varphi) \in \mathbb{R}_+ \times (0, \pi) \times (0, 2\pi)$ a absolutní hodnota Jakobiánu transformace je $|\mathcal{J}_{\text{sf}}| = r^2 \sin \theta$. Dále jsme využili tvar funkce popisující základní stav $|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}$. Pro \hat{y} a \hat{z} je ověřen obdobné.

¹⁶ Označili jsme integrál v (64) (bez \mathbf{i}) \bar{I} a poté užili rovnosti $i\bar{I} - iI = 2\text{Im}I$.

kde bod ξ_0 je bodem maxima funkce g a a_i jsou vlastní čísla matice \mathbb{A} , což je matice druhé derivace funkce g v bodě ξ_0 , tj.

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 g}{\partial \xi_1 \partial \xi_1}(\xi_0) & \cdots & \frac{\partial^2 g}{\partial \xi_1 \partial \xi_n}(\xi_0) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 g}{\partial \xi_n \partial \xi_1}(\xi_0) & \cdots & \frac{\partial^2 g}{\partial \xi_n \partial \xi_n}(\xi_0) \end{pmatrix}. \quad (70)$$

Nyní použijeme approximaci (69) na vnitřní integrál v (68). Najdeme extrém funkce v exponencielle a označíme bod extrému \mathbf{p}_s , dostaneme tak rovnice

$$\frac{\partial \mathcal{S}(t_1, t, \mathbf{p}_c + \mathbf{A}(t_s))}{\partial (p_c)_j} = (p_c)_j(t - t_1) + \int_{t_1}^t A_j(t_2) dt_2 = 0. \quad (71)$$

Odtud určíme \mathbf{p}_s a navíc vidíme, že všechny mimodiagonální prvky matice druhé derivace \mathcal{S} jsou nulové a determinant je tedy součinem diagonálních prvků, což jsou právě vlastní čísla matice \mathbb{A} , celkem

$$\mathbf{p}_s = -\frac{\int_{t_1}^t \mathbf{A}(t_2) dt_2}{t - t_1}, \quad \det\left(\frac{\partial^2 \mathcal{S}}{\partial (p_c)_j \partial (p_c)_k}\right) = (t - t_1)^3. \quad (72)$$

Výraz (68) můžeme pomocí Saddle point approximation přepsat jako

$$\mathbf{r}(t) \approx 2\text{Im} \int_{-\infty}^t \left(\frac{2\pi}{-\mathbf{i}(t - t_1)} \right)^{\frac{3}{2}} \tilde{\mathbf{d}}(\mathbf{p}_s + \mathbf{A}(t)) \mathcal{E}(t_1) \overline{\tilde{\mathbf{d}}(\mathbf{p}_s + \mathbf{A}(t_1))} e^{i \int_{t_1}^t (\frac{1}{2}(\mathbf{p}_s + \mathbf{A}(t_2))^2 + I_P) dt_2} dt_1. \quad (73)$$

V tomto integrálu ještě zavedeme substituci $\tau = t - t_1$, tato substituce má také fyzikální smysl, τ je čas, který elektron strávil v kontinuu. Integrál který máme je navíc divergentní, proto provedeme regularizaci¹⁷, dostaváme tak finální výraz

$$\mathbf{r}(t) \approx 2\text{Im} \int_0^{+\infty} \left(\frac{\pi}{\varepsilon - i\frac{\tau}{2}} \right)^{\frac{3}{2}} \tilde{\mathbf{d}}(\mathbf{p}_s + \mathbf{A}(t)) \mathcal{E}(t - \tau) \overline{\tilde{\mathbf{d}}(\mathbf{p}_s + \mathbf{A}(t - \tau))} e^{i \int_{t-\tau}^t (\frac{1}{2}(\mathbf{p}_s + \mathbf{A}(t_2))^2 + I_P) dt_2} d\tau, \quad (74)$$

\mathbf{p}_s můžeme také spočítat pomocí stejně substituce, dostaneme $\mathbf{p}_s = -\tau^{-1} \int_{t-\tau}^t \mathbf{A}(t_1) dt_1$. Podívejme se nyní na tento výsledek z pohledu klasického tříkrokového modelu a pokusme se ho fyzikálně interpretovat. První člen lze interpretovat jako kvantové rozplývání elektronu v kontinuu a způsobuje to, že do výsledné střední polohy nejvíce přispívají elektrony rekombinující v krátkých návratových časech τ . Druhý člen můžeme chápat jako amplitudu pravděpodobnosti rekombinace elektronu s kanonickou hybností \mathbf{p}_s v čase t . Další dva členy můžeme chápat jako amplitudu pravděpodobnosti ionizace v čase $t - \tau$ a poslední exponencielu můžeme chápat jako vliv pohybu v budícím poli s konstantní kanonickou hybností \mathbf{p}_s na fázi vlny generovaného elektrického pole, které vzniká při rekombinaci elektronu.

3.5 Spektrum výsledného pulzu

Pokud známe časový vývoj střední hodnoty polohy elektronu můžeme pomocí vztahu (38) najít generované pole případně rovnou spektrum tohoto záření.

Vyzářované spektrum tedy závisí na druhé derivaci polohy, získáme ho Fourierovou transformací

$$\mathcal{E}(\omega, z = z_0) = \mathcal{F} \left[\frac{\ddot{x}(t - \frac{z_0}{c})}{4\pi\varepsilon_0 c^2 z_0} \right] (\omega) = \frac{(\mathbf{i}\omega)^2}{4\pi\varepsilon_0 c^2 z_0} \mathcal{F} \left[x \left(t - \frac{z_0}{c} \right) \right] (\omega) = \frac{-\omega^2 e^{i\frac{z_0}{c}\omega}}{4\pi\varepsilon_0 c^2 z_0} \mathcal{F}[x(t)](\omega). \quad (75)$$

¹⁷Používáme fyzikální konvenci, kdy se před regularizovaným výrazem nepíše $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+}$, ale myslí se automaticky [4].

3.6 Vyprázdnění základního stavu - ADK model

Jak jsme již zmínili v intuitivním popisu tohoto jevu, k fázi rekombinace nemusí vždy dojít a to způsobuje, že se zmenšuje počet atomů v základním stavu. Tím je efektivně zabraňováno tomu, aby tříkrokový model proběhl a dochází k útlumu generace záření. Navíc to způsobuje vznik plazmatu, které podstatně mění optické vlastnosti prostředí. Tento proces je popsán tzv. ADK modelem.¹⁸ V SFA approximaci lze tyto výpočty použít ke korekci členu $a(t)$ ve vztazích (44) a (66). V modelu představeném v této práci nakonec tuto korekci nebudeme používat, nicméně je ve fyzice interakce interakce intenzivního laseru s atomem natolik známá, že je vhodné ji zmínit. Vztahy pro tuto approximaci uvedeme bez odvození a odkážeme se na literaturu [25]. Pro počet vázaných elektronů v čase t můžeme psát rovnici

$$\frac{dN(t)}{dt} = -w(t)N, \quad (76)$$

$w(t)$ se nazývá *míra ionizace* a právě jejím určením se zabývá ADK model. Uvažujeme vždy pouze ionizaci valenčního elektronu, pro který ADK model dává

$$w(t) = |C_{n^*l^*}|^2 \left(\frac{3|\mathcal{E}(t)|}{\pi F} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2F}{|\mathcal{E}(t)|} \right)^{2n^*} \left(\frac{|\mathcal{E}(t)|}{2F} \right)^{m+1} f(l, m)(-E_{n^*}) e^{-\frac{2F}{3|\mathcal{E}(t)|}}, \quad (77)$$

$\mathcal{E}(t)$ je amplituda budícího pulzu, E_{n^*} je vazebná energie $n.$ energetického stavu a n^*, l^* jsou efektivní kvantová čísla, u nichž je započítána korekce na přítomnost dalších elektronů v atomovém obalu, m je magnetické kvantové číslo a C, F, f jsou funkce dány předepsy

$$|C_{kj}|^2 = \frac{2^{2k}}{k\Gamma(k+j+1)\Gamma(k-j)}, \quad F = (-2E_{n^*})^{\frac{3}{2}}, \quad f(l, m) = \frac{(2l+1)(l+|m|)!}{2^{|m|}|m|!(l-|m|)!}. \quad (78)$$

Protože se tyto závislosti liší pro elektrony ve stejném energetickém stavu pro různá m , je výsledná ADK míra ionizace dána jejich průměrem, tj.

$$w_{\text{ADK}}(t) = \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l w_m(t). \quad (79)$$

Řešení rovnice (76) potom napíšeme ve tvaru

$$N(t) = N_0 e^{-\int_{-\infty}^t w_{\text{ADK}}(\tilde{t}) d\tilde{t}}, \quad (80)$$

N_0 je celkový počet atomů plynu, předpokládáme, že před příchodem pulzu plyn nebyl ionizován.

¹⁸Tento model odvodili v roce 1986 fyzici Maxim V. Ammosov, Nikolai B. Delone a Valdimir P. Kraňov [25].

4 Popis vygenerovaného záření

4.1 Šíření intenzivního laserového impulzu v plynném prostředí

V předchozím textu jsme si představili odezvu jednoho atomu na pole budícího pulzu. Problémem, kterým se budeme zabývat dále je šíření generovaného pole společně s polem budícího pulzu v prostředí, kterým je v našem případě plyn, jehož atomy způsobují generaci vysokých harmonických frekvencí. V principu se nejedná o jednoduchý problém, protože šíření je ovlivněno mnoha faktory, které mají vliv na absorpci a fázový posun jednotlivých komponent šířícího se pole. V první řadě je rychlosť šíření pulzu různá pro různé frekvence, tento jev se nazývá *lineární disperze* a způsobuje vzájemný fázový posuv jednotlivých spektrálních složek záření. Dále zde vystupují nelineární jevy, které závisí na intenzitě pulzu a obecněji na vyšších mocninách elektrického pole \mathcal{E} , těmito jevy se zabývá nelineární optika. Typickým důsledkem této závislosti je například Kerrův jev. Dalším jevem, který nám situaci komplikuje, je vytváření volných elektronů. Tohoto jevu jsme se už dotkli v samotném modelu jednoatomové odezvy. Jedná se o elektrony, které zpátky nerekombinovaly s mateřským atomem a zůstaly tak volné. Pro samotnou generaci vysokých harmonických frekvencí pro nás nebyly důležité. Ovšem šíření pulzu ovlivňuje značně, způsobuje vznik plazmatu, které má odlišné optické vlastnosti než neionizovaný plyn. Poslední věc, kterou zmíníme, jsou vlastnosti vyplývající přímo z geometrie budícího pulzu, kterou jsme rozebírali v 2. kapitole. Díky tomu je generované pole odlišné v různých místech prostoru. Řešením těchto problémů se v terminologii attosekundové fyziky zabývá tzv. *phase matching*.¹⁹

4.1.1 Lineární disperzní médium

V této práci se omezíme na jednodušší model *lineárního disperzního prostředí*, tj. prostředí, kde považujeme jednotlivé komponenty pole za šířící se nezávisle a bereme v úvahu pouze jevy spojené s první mocninou \mathcal{E} . Vyjdeme z teorie pro šíření monochromatické vlny. Připomeňme tedy tento případ a zkoumejme šíření ve směru osy z , použijeme rovinnou vlnu (1), s $\varphi = 0$. Vlnové číslo k nyní závisí na úhlové frekvenci, tj. $k = k(\omega)$ a charakterizuje nám rychlosť šíření vlny s daným ω v disperzním prostředí, navíc dochází k absorpci, která je charakterizována koeficientem absorpcie $\alpha_{\text{abs}}(\omega)$. Popis výsledné rovinné vlny je

$$\mathcal{E}_x(z, t) = \mathcal{E}_0 e^{-\frac{\alpha_{\text{abs}}}{2} z} \cos(\omega t - k(\omega)z). \quad (81)$$

Je vhodné popisovat absorpci i disperzi pomocí komplexního vlnového čísla $\tilde{k} = k + i\alpha_{\text{abs}}/2$. Vztah (81) potom zapíšeme ve tvaru

$$\mathcal{E}_x(z, t) = \text{Re}\left(e^{-i(\omega t - \tilde{k}(\omega)z)}\right). \quad (82)$$

Zapišme explicitně, jak bude vypadat pulz, který projde disperzním prostředím délky L , které začíná v bodě z_0 ,

$$\mathcal{E}_r(z_0 + L, t) = \text{Re}\left(e^{-i(\omega t - \tilde{k}(\omega)(z_0 + L))}\right) = \text{Re}\left(e^{-i(\omega t - \tilde{k}(\omega)z_0 - \tilde{k}(\omega)L)}\right). \quad (83)$$

Ukazuje se, že je výhodnější popisovat elektrické pole propagujícího se pulzu v závislosti na úhlové frekvenci. Je to způsobeno tím, že vlnové číslo je funkcí úhlové frekvence ω . Od času přejdeme k úhlové frekvenci pomocí Fourierovy transformace, kterou budeme používat ve tvaru

$$\mathcal{F}[f(t)](\omega) = \int_{\mathbb{R}} f(t) e^{i\omega t} dt. \quad (84)$$

Znak Fourierovy transformace nebude dále psát, pokud to nebude třeba pro zdůraznění, a to, jestli pracujeme s transformovaným či netransformovaným polem, budeme značit pomocí argumentu funkce t nebo ω . Nyní zjistíme, jak vypadá obecná rovinná vlna v bodě $z_0 + L$ a využijeme

¹⁹Tento výraz pochází z toho, co je naším obvyklým cílem při návrhu experimentu. Chceme aby při vzniku attosekundového pulzu docházelo ke konstruktivní interferenci mezi vznikajícím polem a polem již vygenerovaným, tj. požadujeme aby odpovídala fáze těchto polí.

toho, jak se transformuje monochromatická vlna (83). Protože jsou Maxwellovy rovnice lineární, bude řešením i superpozice rovinných monochromatických vln.²⁰ Toto řešení je v bodě z_0 ve tvaru

$$\mathcal{E}(z_0, t) = \int_{\mathbb{R}} \tilde{\mathcal{E}}(\tilde{\omega}) e^{-i(\tilde{\omega}t - \tilde{k}(\tilde{\omega})z_0)} d\tilde{\omega}, \quad (85)$$

kde $\tilde{\mathcal{E}}(\tilde{\omega})$ je nějaká integrovatelná funkce. Nyní ukážeme, že ve frekvenční doméně platí rovnost

$$\mathcal{E}(z_0 + L, \omega) = \mathcal{E}(z_0, \omega) e^{i\tilde{k}(\omega)L}. \quad (86)$$

Tento vztah dokážeme pomocí Fourierovy transformace aplikované na řešení ve tvaru (85). Nejprve si připravíme, jak vypadá řešení ve frekvenční doméně v bodě z

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(z, \omega) &= \mathcal{F}[\mathcal{E}(z, t)](\omega) = \mathcal{F}\left[\int_{\mathbb{R}} \tilde{\mathcal{E}}(\tilde{\omega}) e^{-i(\tilde{\omega}t - \tilde{k}(\tilde{\omega})z)} d\tilde{\omega}\right](\omega) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{\mathcal{E}}(\tilde{\omega}) e^{-i(\tilde{\omega}t - \tilde{k}(\tilde{\omega})z)} e^{i\omega t} d\tilde{\omega} dt = \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \tilde{\mathcal{E}}(\tilde{\omega}) e^{i\tilde{k}(\tilde{\omega})z} e^{i(\omega - \tilde{\omega})t} dt d\tilde{\omega} = \int_{\mathbb{R}} \tilde{\mathcal{E}}(\tilde{\omega}) e^{i\tilde{k}(\tilde{\omega})z} \delta(\omega - \tilde{\omega}) d\tilde{\omega} = \tilde{\mathcal{E}}(\omega) e^{i\tilde{k}(\omega)z}. \end{aligned} \quad (87)$$

Tedy můžeme psát

$$\mathcal{E}(z_0, \omega) e^{i\tilde{k}(\omega)L} = \tilde{\mathcal{E}}(\omega) e^{i\tilde{k}(\omega)z_0} e^{i\tilde{k}(\omega)L} = \tilde{\mathcal{E}}(\omega) e^{i\tilde{k}(\omega)(z_0 + L)} = \mathcal{E}(z_0 + L, \omega). \quad (88)$$

Tím je vztah (86) dokázán. Nyní řešení vyjádříme pomocí komplexního indexu lomu prostředí $\tilde{n}(\omega)$, který je spojen s vlnovým číslem $\tilde{k}_z(\omega)$ vztahem $\tilde{n}(\omega) = \frac{c}{\omega} \tilde{k}_z(\omega)$. Reálná část indexu lomu je klasický index lomu, tj. $\text{Re}(\tilde{n}) = \frac{c}{\omega} k_z(\omega)$ a imaginární část popisuje absorpci, tj. $\text{Im}(\tilde{n}) = \frac{c}{2\omega} \alpha_{\text{abs}}$. Můžeme tedy přepsat vlnový vektor pomocí indexu lomu ve tvaru $\tilde{k}_z = \frac{\omega}{c} \tilde{n}(\omega)$ a vztah (86) dostane tvar

$$\mathcal{E}(z_0 + L, \omega) = \mathcal{E}(z_0, \omega) e^{i\frac{\omega}{c} \tilde{n}(\omega)L}. \quad (89)$$

Pro praktické použití je třeba mít znalost $\tilde{n}(\omega)$ pro různé vlnové délky záření. Pro plyny se kterými pracujeme lze \tilde{n} v krátkovlnné části spektra vyjádřit ve tvaru [5, 1]

$$\tilde{n}(\lambda) = 1 - \frac{r_e N}{2\pi} \lambda^2 (f_1 + i f_2), \quad (90)$$

λ je dána vztahem $\lambda = 2\pi \frac{c}{\omega}$, $r_e = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{e^2}{m_e c}$ je klasický poloměr elektronu (m_e je hmotnost elektronu), N je počet atomů plynu v jednotce objemu a f_1 , f_2 jsou atomové rozptylové faktory, které jsou tabulovány pro různé plyny. Pro většinu plynů je možno najít koeficienty v on-line databázi [40].

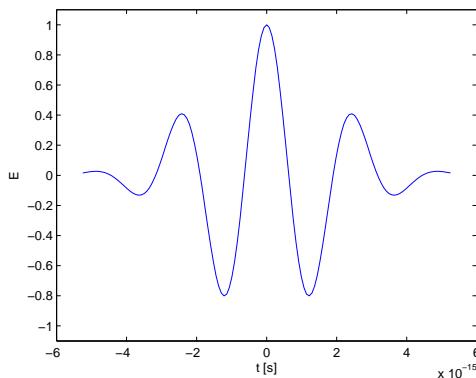
²⁰V tomto tvaru lze zapsat libovolné řešení Maxwellových rovnic, tímto faktorem se tu nabudeme zabývat a lze nalézt např. v [3].

5 Vytvoření jediného attosekundového impulzu

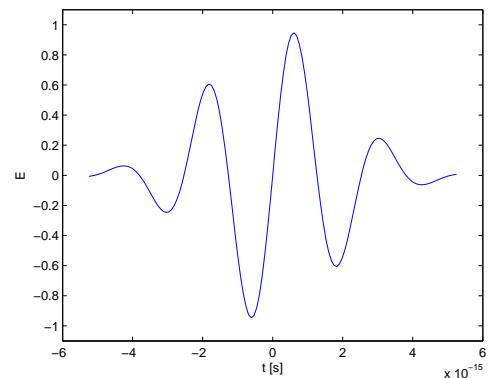
Doposud jsme se zabývali interakcí v průběhu celého budícího pulzu a v SFA approximaci jsme zjistili, že k tříkrokovému procesu dochází během každé půlperiody budícího pole. Pro některé aplikace se ukazuje jako důležité vytvořit jediný impulz. Nyní si představíme způsoby generace jednotlivých attosekundových impulzů, které se používají v závislosti na délce trvání budícího pulzu.

5.1 Krátké budící pulzy (\sim fs)

Pro velmi krátké budící pulzy je podstatný vliv vzájemného fázového posunutí obálky budícího pulzu a samotného pole budícího laseru. Je to způsobeno tím, že vlastní perioda budícího pole je srovnatelná s délkou trvání pulzu. Představme si dvě krajní možnosti. První je *cosinový pulz*, kdy je vzájemný fázový posuv $\varphi = 0$, to znamená, že v maximu obálky pulzu se nachází také maximum základního pole. Druhým krajním případem je *sinový pulz*, kdy se v maximu obálky pulzu nachází minimum základního pole, odpovídá tomu posuv $\varphi = \pi/2$. Tato charakteristika není pro daný pulz časově neměnná, protože se obálka pulzu pohybuje grupovou rychlosťí v_g a základní pole fázovou rychlosťí v_f a tyto rychlosťi jsou obecně různé. Vztah mezi těmito veličinami je dán disperzním vztahem pro dané prostředí. V našem modelu předpokládáme šíření budícího svazku ve vakuu, tj. nezávisle na prostředí, protože ale používáme Gaussovský svazek, popsáný vztahem (18), projeví se tento efekt i zde ve formě Gouyova fázového posuvu ϕ_G .



Obrázek 12: Cosinový pulz.



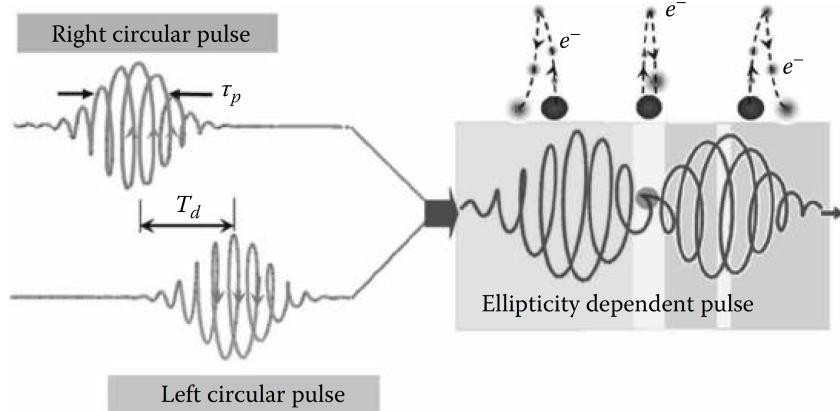
Obrázek 13: Sinový pulz.

Charakter pulzu významně ovlivňuje vzniklé pole. V případě cosinového pulzu vzniká pouze jeden attosekundový impulz v maximu obálky budícího pulzu, zatímco v případě sinového pulzu mohou vznikat dva menší impulzy, vzdálené od sebe o půlperiodu budícího pole. Je třeba zmínit, že ani v případě cosinového pulzu nejsou zcela potlačeny odezvy ostatních maxim, nicméně odezva od největšího maxima obsahuje vyšší frekvence, než od odezva ostatních maxim. Proto se pro potlačení této odezvy používají nízkofrekvenční filtry.

5.2 Dlouhé budící pulzy (\sim 10 fs)

V obálce jednoho budícího pulzu se nachází větší počet period základního pole. Vzniká tak série po sobě jdoucích attosekundových impulzů vzdálených od sebe o půlperiodu budícího pole—attosecond pulse train (pro běžně používaný Ti:Safírový laser s vlnovou délkou 800 nm je tato vzdálenost přibližně 1.3 fs). Pokud máme již vytvořenou sérii pulzů mimo médium je velmi obtížné z nich jeden vybrat, proto se používají metody, kterým zajistíme aby byl již v médiu, kde probíhá generace impulzů, vytvořen pouze jediný. Zmíníme dva způsoby, jak toho lze dosáhnout.

5.2.1 Dva kruhově polarizované budící pulzy



Obrázek 14: Vznik jediného attosekundového impulzu pomocí dvou navzájem zpožděných, opačně kruhově polarizovaných Gaussovských pulzů. V pravé části obrázku jsou znázorněny trajektorie elektronů e^- , pro různé časy jejich uvolnění. Převzato z [24].

Představíme první způsob, jak lze dosáhnout generace jediného attosekundového impulzu. Tento jev lze dobře analyticky popsat pomocí klasického modelu, který jsme použili v sekci 3.3. Uvažujeme nyní kruhově levotočivě polarizovaný Gaussovský pulz s nulovým fázovým posuvem

$$\mathcal{E}_l(t) = \mathcal{E}_0 e^{-2 \ln(2) \left(\frac{t}{\tau_g}\right)^2} [\mathbf{e}_x \cos(\omega_0 t) + \mathbf{e}_y \sin(\omega_0 t)] , \quad (91)$$

\mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y jsou jednotkové vektory ve směrech x a y . Uvažujeme nyní pole složené ze dvou opačně kruhově polarizovaných Gaussovských pulzů, vzájemně zpožděných o celočíselný násobek n poloviny vlastní periody t_0 ²¹

$$\mathcal{E}_l(t) = (-1)^n \mathcal{E}_0 e^{-2 \ln(2) \left(\frac{t - \frac{t_0}{2}}{\tau_g}\right)^2} [\mathbf{e}_x \cos(\omega_0 t) + \mathbf{e}_y \sin(\omega_0 t)] , \quad (92)$$

$$\mathcal{E}_r(t) = (-1)^n \mathcal{E}_0 e^{-2 \ln(2) \left(\frac{t + \frac{t_0}{2}}{\tau_g}\right)^2} [\mathbf{e}_x \cos(\omega_0 t) - \mathbf{e}_y \sin(\omega_0 t)] , \quad (93)$$

počátek časové osy jsme volili $t_0/2$ po maximu prvního pulzu. Porovnáme složky výsledného pole $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_l(t) + \mathcal{E}_r(t)$ v jednotlivých směrech

$$\mathcal{E}_x(t) = (-1)^n \mathcal{E}_0 \left(e^{-2 \ln(2) \left(\frac{t + \frac{t_0}{2}}{\tau_g}\right)^2} + e^{-2 \ln(2) \left(\frac{t - \frac{t_0}{2}}{\tau_g}\right)^2} \right) \cos(\omega_0 t) , \quad (94)$$

$$\mathcal{E}_y(t) = (-1)^n \mathcal{E}_0 \left(e^{-2 \ln(2) \left(\frac{t + \frac{t_0}{2}}{\tau_g}\right)^2} - e^{-2 \ln(2) \left(\frac{t - \frac{t_0}{2}}{\tau_g}\right)^2} \right) \sin(\omega_0 t) , \quad (95)$$

dostali jsme tedy ellipticky polarizovaný pulz. Pokud v tomto případě použijeme tříkrokový model generace vysokých harmonických frekvencí. Zjistíme z pohybových rovnic elektronu (32), že není

²¹Tento výsledek lze zobecnit na libovolný časový posun [1].

možné zároveň splnit podmínu rekombinace pro čas návratu t'' , tj. $x(t'') = y(t'') = 0$, pro elipticky polarizovaný pulz. Proto generace probíhá pouze v okamžiku, kdy je pulz lineárně polarizovaný, což je podle (94) a (95) pouze v $t = 0$. Tento mechanismus je znázorněn na obrázku 14. Poprvé se podařilo tento způsob generace jediného attosekundového impulzu experimentálně ověřit v roce 2004 [24].

5.2.2 Dvoubarevné pulzy

K buzení použijeme pole dvou různých budících laserů s různými vlnovými délками (např. 800 nm a 650 nm), jejich pole spolu interferují a nejsilnější attosekundové impulzy pak vznikají ve chvíli, kdy je tato interference konstruktivní. Pro výběr právě téhoto impulzů je možno použít nízkofrekvenční filtr. Tímto způsobem generace se nebudeme dále detailně zabývat, protože vždy záleží na konkrétních vlnových délkah budících polí, které skládáme. Jedním ze speciálních případů je použití druhé harmonické frekvence budícího pole a je rozebrán v [1]. Výhodou pro popis tohoto způsobu generace jednoho impulzu je, že můžeme použít výsledek SFA (74), protože je odvozen pro obecný tvar budícího pole $\mathcal{E}(t)$.

6 1–D model generace vysokých harmonických frekvencí

Na základě výše popsané teorie autor vytvořil počítačový model, který provede výpočet tvaru vzniklého pole při průchodu budícího pulzu lineárním disperzním médiem. Využijeme zde výsledky představené v 2., 3. a 4. kapitole. Nejdříve si ujasníme vstupní parametry tohoto modelu. Předpokládáme šíření pulzu v médiu délky L , obsahující jeden druh neionizovaného plynu. Tento plyn charakterizujeme pomocí tlaku p a teploty T . Tímto plynem prochází svazek budícího laseru, který má vlnovou délku λ a maximální intenzitu I_0 . Použijeme Gaussovský pulz s chirpem b_g , délky τ_g , s konstantním fázovým posuvem φ a Gaussovský svazek charakterizovaný polohou ohniska z_0 a poloměrem svazku v ohnisku w_0 (místo této charakteristiky můžeme použít i Rayleighovu vzdálenost z_R), nebo se můžeme omezit na Gaussovský pulz s prostorovým průběhem rovinné vlny. Nyní uvedeme předpoklady, za kterých model vytváříme.

- Plyn, kterým se šíří budící pulz je homogenní a jeho parametry se nemění s časem.
- Budící pulz se pohybuje prostředím rychlostí světla bez disperze a absorpce, jediné, co ovlivňuje jeho vlastnosti, jsou parametry Gaussovského svazku.
- Pracujeme s atomy vodíku.
- U generovaného pulzu započítáváme disperzi a absorpci. Nelineární jevy neuvažujeme.

Ze zadaných hodnot potřebujeme získat počet atomů na jednotku objemu, jednak kvůli výpočtu indexu lomu (90) a jednak kvůli výpočtu výsledného pole, které získáme vynásobením počtu atomů s elektrickým polem vzniklým na jednom atomu. Počet atomů N na jednotku objemu V získáme pomocí termodynamického vztahu

$$pV = Nk_B T. \quad (96)$$

6.1 Algoritmus pro popis generace pulzu v disperzním médiu

Nyní si schematicky představme algoritmus k výpočtu generovaného pole.

1. Prostředí, kterým se šíří budící pulz rozdělíme na M_L stejně dlouhých buněk a určíme v něm průběh intenzity Gaussovského svazku podle vztahu (17), protože se zabýváme pouze šířením ve směru osy svazku, je $x = y = 0$. Dále určíme pomocí (96) a (90) počet atomů v jedné buňce N_1 a index lomu \tilde{n} .
2. Spustíme jednoatomový model s amplitudou $\mathcal{E}_l(z)$ a fázovým posunutím φ v první buňce, určenými podle kroku 1. Pomocí jednoatomového modelu (popsaného v oddílu 6.2) určíme odezvu jednoho atomu $\mathcal{E}_1(\omega, 1)$ v první buňce ve frekvenční doméně. Celkovou odezvu získáme vynásobením počtem atomů v jedné buňce, takže generované pole je $\mathcal{E}_g(\omega, 1) = N_1 \cdot \mathcal{E}_1(\omega, 1)$.
3. Spustíme jednoatomový model v M . buňce, získáme odezvu jednoho atomu $\mathcal{E}_1(\omega, M)$. Pole vycházející z M . buňky je součet pole zde vygenerovaného a pole, které sem přišlo z $(M - 1)$. buňky za vlivu disperze a absorpce dle vztahu (89). Výsledné pole je tak

$$\mathcal{E}(\omega, M) = \mathcal{E}_g(\omega, M) + e^{-i\frac{\omega}{c}(\tilde{n}(\omega)-1)\Delta z} \mathcal{E}(\omega, M-1), \quad (97)$$

Δz je vzdálenost mezi jednotlivými středy buněk. Tento krok opakujeme, dokud nedojdeme na konec média.

4. Předešlými kroky jsme získali závislost pole vzniklého pulzu ve frekvenční doméně $\mathcal{E}(\omega)$. Pokud potřebujeme výsledné pole v závislosti na čase, provedeme inverzní Fourierovu transformaci a získáme $\mathcal{E}(t)$.

6.2 Algoritmus pro jednoatomovou odezvu.

1. Vytvoříme Gaussovský pulz podle vztahu (4) s danými parametry, to znamená, že vytvoříme funkce elektrického pole $\mathcal{E}(t)$ a vektorového potenciálu $A(t)$. Souřadnou soustavu volíme tak, že maximum pulzu je v bodě $t = 0$.²² Je třeba zvolit vhodnou diskretizaci, tu volíme tak, aby $\Delta t \leq 2\hbar/eE_{\gamma,\max}$, Δt je vzdálenost vedlejších bodů, $E_{\gamma,\max}$ určíme z klasického modelu (36), je to proto, abychom byli schopni zajistit všechny harmonické ve výsledném spektru až do cutoffu. Celkovou délku časové základny zvolíme tak, aby byl pokrytý průběh elektrického pole i v nějakém okolí délky pulzu, tj. $(-\tau_g/2, \tau_g/2)$.
2. Provedeme výpočet střední polohy elektronu podle vztahu (74), je vhodné pro rychlejší výpočet zvolit místo integrálu $\int_0^{+\infty}$ integrál $\int_0^{T_m}$, kde T_m je čas trvání několika period budícího pulzu, protože do výsledné střední hodnoty přispívá především několik málo period po uvolnění elektronu. Opravňuje nás k tomu analýza vztahu (74).
3. Provedeme Fourierovu transformaci druhé derivace polohy elektronu (75), výsledkem je vygenerované pole jednoatomové odezvy ve frekvenční doméně, tj. $\mathcal{E}_1(\omega)$.

6.3 Výpočet pomocí programu MATLAB®

Autor práce se rozhodl použít k výpočtu program MATLAB® a vytvořený kód lze nalézt v dodatku C. V tomto konkrétním případě bylo použito Gaussovského pulzu pro vektorový potenciál $A(t)$, je to způsobeno tím, že lze použít analytický tvar $\mathcal{E}(t) = -\partial_t A(t)$. Tato volba je velmi blízká nechirpovaným Gaussovským pulzům v $\mathcal{E}(t)$.²³ V případě použití chirpu dostaneme pulz pouze podobný chirpovanému v $\mathcal{E}(t)$ a maximum tohoto pulzu již není v bodě $t = 0$.²⁴ Výpočet zajišťují dva hlavní programy, které provádějí výpočet podle algoritmů představených v minulých dvou odstavcích.

prop.m Řídící skript, ve kterém jsou v záhlaví nastaveny veškeré vstupní parametry a samotný skript počítá pole generované Gaussovským pulzem podle prvního algoritmu. Výpočet může být proveden buď pro Gaussovský svazek, nebo pro rovinou vlnu. Shrňme si nyní všechny parametry, které ke vstupu používáme. Jsou to délka média L , teplota plynu T a tlak p . Pro budící pole je to vlnová délka λ , délka pulzu τ_g , parametr chirpu b_g a maximální intenzita I_0 , při použití Gaussovského svazku jsou navíc jeho parametry šířka svazku v ohnisku w_0 a souřadnice ohniska z_0 . Dále tu jsou pomocné konstanty pro numerický výpočet, jsou to: délka časového okna pro budící pulz udaná v jednotkách τ_g , počet buněk rozdělení média, počet bodů rozdělení časového průběhu budícího pulzu (lze zadat fixní, nebo vypočítaný tak, aby byla po výpočtu Fourierovy transformace mírně přesážena oblast předpokládaného cutoffu) a počet period budícího pole, které jsou započítány do generace jednoho impulzu.

dipol.m Funkce, která se stará o výpočet jednoatomové odezvy podle druhého algoritmu. Pro výpočet integrálu (74) je použita lichoběžníková metoda.

Dále jsou využity pomocné funkce.

Primint.m Funkce, která zajišťuje numerický výpočet primitivní funkce k libovolnému zadanému vektoru, pro výpočet je použita lichoběžníková metoda.

dm.m Funkce, která vrací hodnotu maticového elementu dipólového přechodu v závislosti na hybnosti.

²²Je třeba upozornit, že tato volba je *nefyzikální*, protože máme soustavu spojenou s pulzem který se pohybuje grupovou rychlostí, kterou máme v našem modelu rovnou c . Pro popis našeho modelu to ale nevadí.

²³Je třeba zmínit, že i samotný Gaussovský pulz v $\mathcal{E}(t)$ představuje model skutečného pulzu a Gaussovský pulz v $A(t)$ můžeme chápat jako jiný velmi podobný model a bez experimentálního ověření nemůžeme říci, že je tento model horší. Tato volba se projeví přičtením člena obsahující funkci sinus ke vztahu (2), který je ale pro námi používané pulzy rádově menší ($\sim \mathcal{E}_0/\omega_0$).

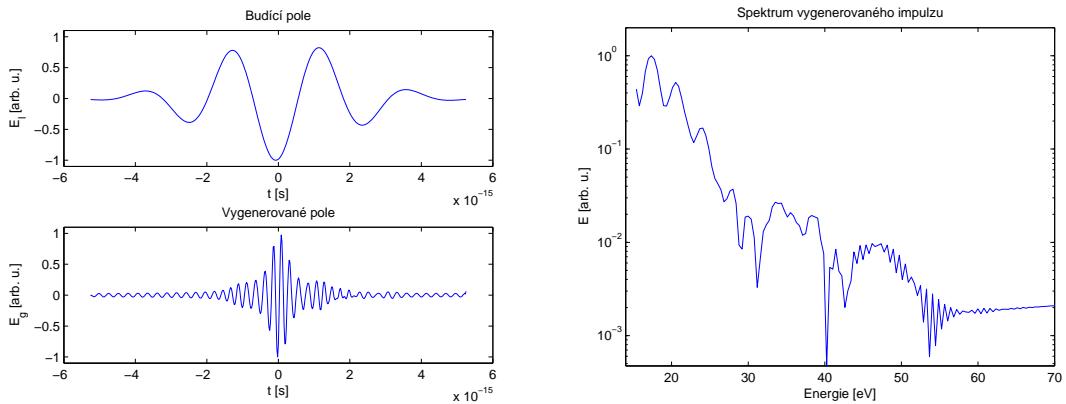
²⁴Oproti nechirpovanému pulzu se nezanedbateLNě změní obálka pulzu, konkrétně $\mathcal{E}_0 \rightarrow \mathcal{E}_0(1 + 2b_g t/\omega_0)$.

`Act.m` Funkce, která počítá hodnotu stacionární akce pro daný čas uvolnění elektronu.

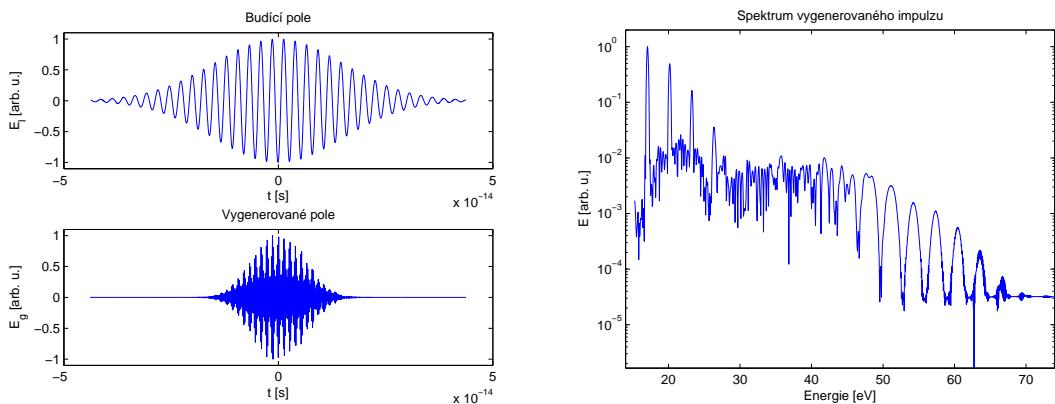
`loadcoef.m` Skript, který provádí výpočet parametrů f_1 a f_2 pro komplexní index lomu \tilde{n} pomocí interpolačního závislosti na tabulkované hodnoty.

6.4 Výsledky

V této kapitole budou shrnutý výpočtu 1-D modelu, vytvořeného autorem práce a popsaném v předchozí kapitole. Výsledky simulací mají demonstrovat funkčnost modelu a zatím si nekladou za cíl optimalizovat podmínky pro vytvoření nějakého konkrétního typu impulzu. Kvůli ilustrativnosti mohou být některé hodnoty nadsazené oproti skutečným podmínkám. Model také zatím nedává kvantitativní výsledky a omezíme se pouze na kvalitativní, proto jsou v popisu grafů použity tzv. *arbitrary units* (arb. u.) nebo také relativní jednotky, ve kterých je popsán charakter závislostí, nikoliv skutečná hodnota veličin. Pokud nebude uvedeno jinak, byly simulace provedeny pro vodíkové atomy při teplotě 20 °C a tlaku 50 mbar, s laserem o vlnové délce 800 nm. Všechny pulzy mají nulový fázový posuv φ a parametr chirpu b_g . Za počátek souřadnic média je považován jeho začátek.



Obrázek 15: Simulace pro prostředí délky $L = 1$ cm a parametry Gaussovsckého svazku: $\tau_g = 3$ fs, $I_0 = 2 \cdot 10^{18} \text{ W m}^{-2}$, poloha ohniska $z_0 = 5$ mm a poloměr svazku v ohnisku $w_0 = 8 \cdot 10^{-5}$ m.



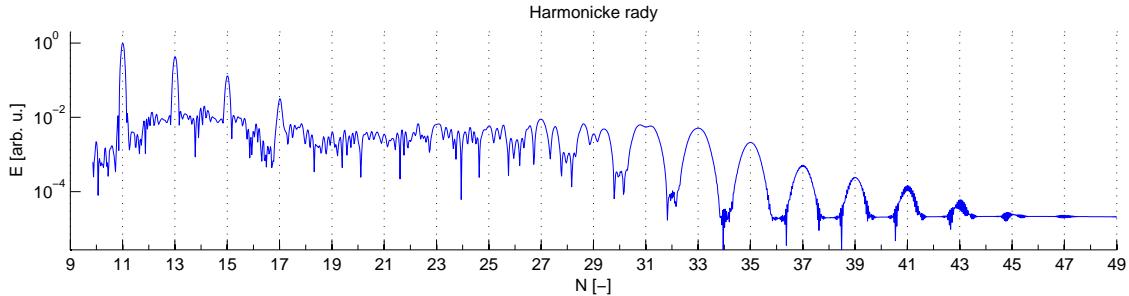
Obrázek 16: Simulace budícího pulzu s délkou $\tau_g = 25$ fs, ostatní parametry shodné jako v simulaci z obrázku 15.

Nejprve si na obrázcích 15 a 16 ukážeme funkce vytvořeného modelu na dvou různých délkách budících pulzů a představíme si, co jednotlivé grafy reprezentují. Horní graf v levé polovině představuje průběh elektrického pole budícího pulzu, graf pod ním představuje průběh elektrického

pole vygenerovaného pulzu, pravý graf představuje spektrum tohoto pulzu, levý dolní a pravý graf jsou tedy ekvivalentní až na fázi jednotlivých frekvencí, která není v pravém grafu znázorněna.

Na grafech v levé části si můžeme všimnout, že každému maximu budícího pole odpovídá jeden vygenerovaný impulz, což odpovídá našemu očekávání. Další vlastnosti generovaného záření budou rozebrány na příkladech v dalších oddílech.

6.4.1 Generace lichých harmonických frekvencí, tvar spektra

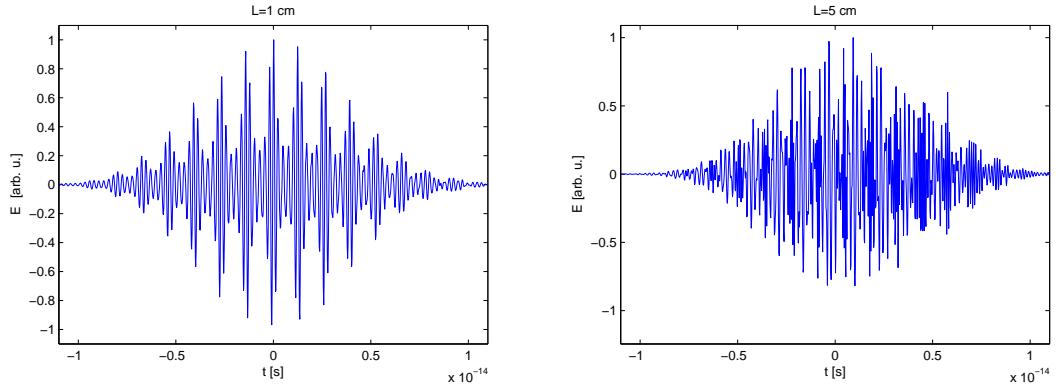


Obrázek 17: Spektrum vygenerovaného záření v závislosti na násobku frekvence N budícího pole. Parametry budícího pulzu: $\tau_g = 30$ fs, $I_0 = 2 \cdot 10^{18}$ Wm $^{-2}$, $z_0 = 2.5$ mm a $w_0 = 6 \cdot 10^{-5}$ m. Délka média $L = 5$ mm.

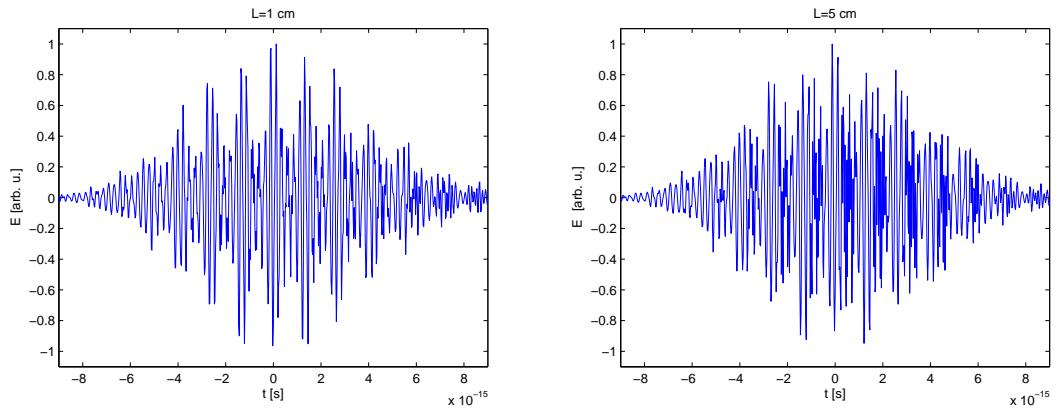
Prvně se podívejme na základní vlastnosti vygenerovaného spektra. Vidíme, že na začátku se nachází silná klesající odezva v nižších harmonických frekvencích a po ní následuje plato, kde je zastoupení daných frekvencí (a tedy i energií) v podstatě konstantní, poté následuje cutoff a exponenciální útlum (v našem případě je to v okolí 30. harmonické frekvence).

Ověříme, že náš model generuje pro delší pulzy liché harmonické frekvence budícího pole, jak bychom očekávali dle úvah z oddílu 3.2. Na obrázku 17 je znázorněno spektrum v závislosti na řádu harmonické frekvence budícího laseru. Ukazuje se, že se generují opravdu především liché harmonické frekvence budícího pole tato závislost je nejlépe pozorovatelné v oblasti začátku spektra: 11. a 13. harmonické frekvence a dále v oblasti cutoffu od 29. harmonické frekvence, v oblasti plata je generace pouze lichých harmonických frekvencí méně výrazná. Příčina tohoto jevu může být ve špatné funkci SFA pro tuto oblast spektra.

6.4.2 Gouyův fázový posuv, disperze generovaných impulzů v médiu



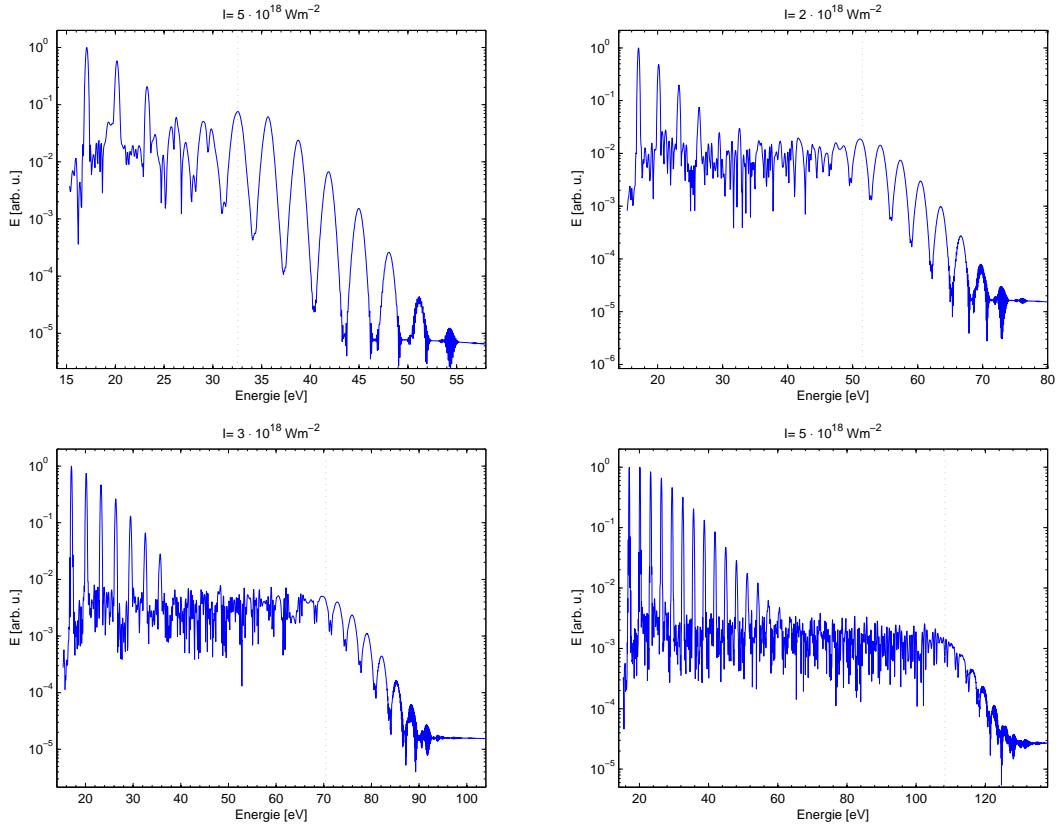
Obrázek 18: Průchod laserového pulzu (Gaussovský svazek a Gaussovský průběh) médiem, délka média je uvedena v názvu jednotlivých grafů. Parametry budícího pulzu: $\tau_g = 15$ fs, $I_0 = 2.5 \cdot 10^{18}$ Wm $^{-2}$, $z_0 = 0$ m a $z_R = 3$ cm.



Obrázek 19: Průchod rovinné vlny s Gaussovským tvarem pulzu disperzním prostředím. Parametry budícího pulzu: $\tau_g = 15$ fs, $I_0 = 2.5 \cdot 10^{18}$ Wm $^{-2}$.

Disperzí generovaných pulzů jsme se zabývali v 4. kapitole, v modelu používáme model lineárního disperzního prostředí, dalšími efekty jsou Gouyův fázový posuv a proměnná intenzita budícího pole na ose z , jak se tyto efekty projeví na vygenerovaném poli je znázorněno na obrázku 18. Při použití krátkého média jsou zřetelné jednotlivé impulzy. Při použití dlouhého média se tyto impulzy spojí dohromady. Abychom si udělali představu, jak se projeví pouze vliv disperze, je na obrázku 19 znázorněn vliv disperze na rovinné vlně s Gaussovským tvarem pulzu. Vidíme, že efekt samotné disperze je velmi podobný, ale rozplynutí pulzu není tak výrazné. Aby byly výsledky dobře porovnatelné je v případě Gaussovského svazku voleno ohnisko na začátku média.

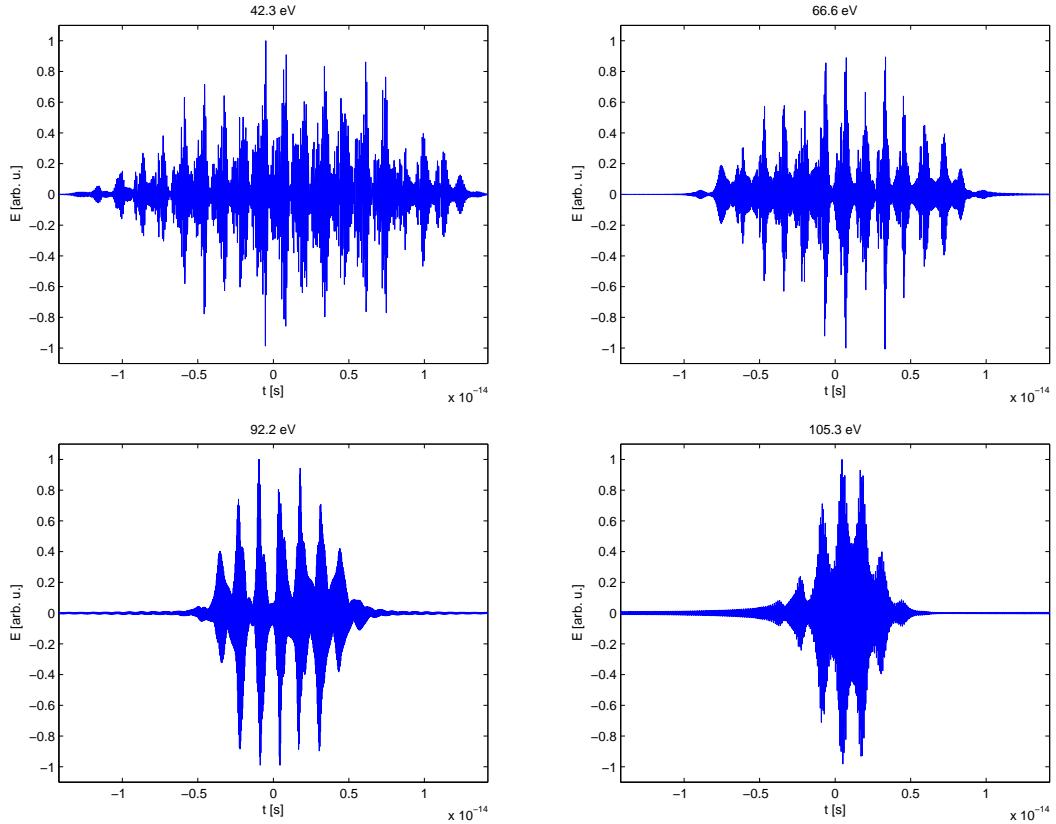
6.4.3 Maximální energie generovaného záření, cutoff



Obrázek 20: Spektrum vygenerovaného záření pro různé intenzity budícího pulzu, intenzita pulzu je uvedena v názvu jednotlivých grafů. Ostatní parametry budících pulzů jsou $\tau_g = 20$ fs, $z_0 = 0.25$ mm a $w_0 = 6 \cdot 10^{-5}$ m. Délka média $L = 0.5$ mm. Svislou čarou je naznačena energie cutoffu dle klasického vztahu (36).

Klasická teorie nám udává, jakou nejvyšší energii můžeme ve spektru výsledného záření očekávat. Na obrázku 20 jsou znázorněny spektra pro různé intenzity budícího pulzu. Vidíme, že pro námi použité intenzity klasická hodnota velmi dobře popisuje cutoff ve spektru vytvořeném v simulacích. Protože jsme použili krátké médium, nejsou tu podstatné vlivy absorpcie a geometrie svazku budícího laseru.

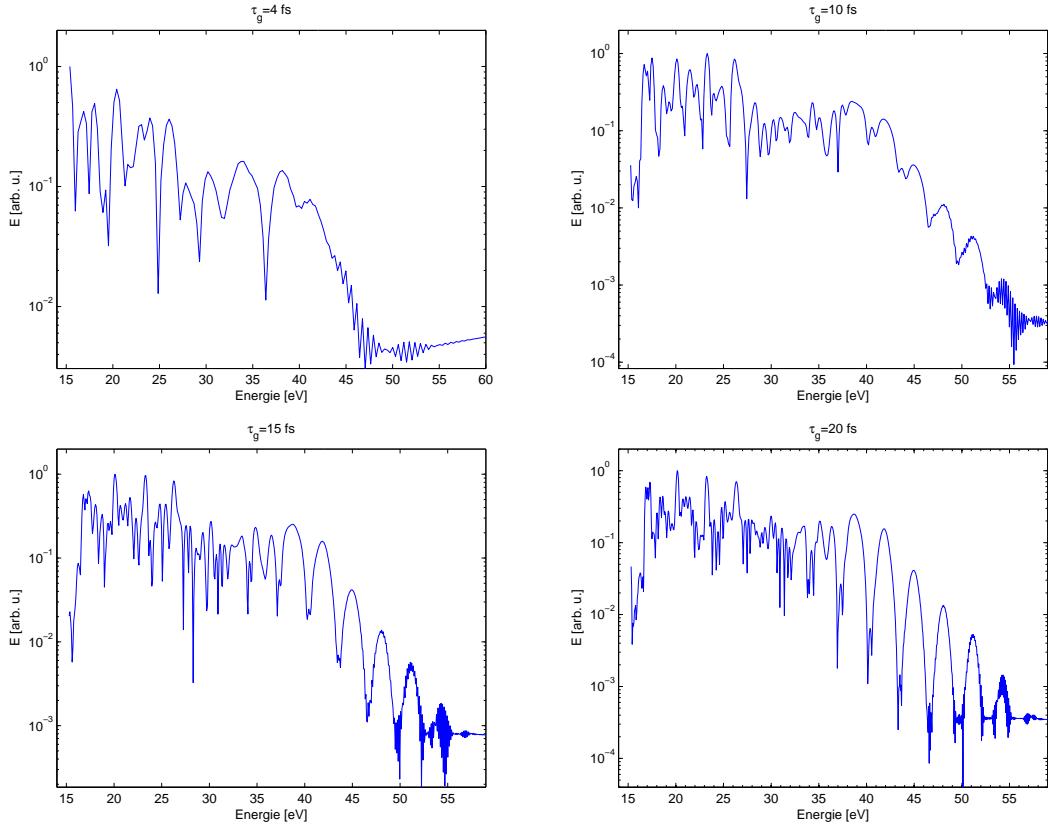
6.4.4 Spektrální filtr



Obrázek 21: Použití různých energetických filtrov, minimální energie pro projití filtrem je uvedena v názvu jednotlivých grafů. Parametry budícího pulzu: $\tau_g = 20$ fs, $I_0 = 5 \cdot 10^{18}$ Wm $^{-2}$, $z_0 = 5$ mm a $w_0 = 6 \cdot 10^{-5}$ m. Délka média $L = 1$ cm.

V 5. kapitole jsme si popsali, že jedním z principů, které se uplatňují při generaci jednotlivých attosekundových impulzů je odfiltrování delších vlnových délek vzniklého záření pomocí energetických filtrov. Prozkoumejme, jak je tuto situaci schopen simulovat vytvořený model. Na obrázku 21 je zobrazeno vygenerované pole po projití čtyřmi různými energetickými filtrov. Při použití prvního filtrov vidíme, že generování impulzů probíhá během celého trvání budícího pulzu. Při použití filtrov 92.2 eV zůstalo pouze 7 výrazných impulzů v okolí maxima budícího pulzu, v případě posledního filtrov to jsou už pouze 3 výrazné impulzy. Je ovšem třeba zdůraznit, že výsledné impulzy jsou normovány nezávisle na ostatních, to znamená, že ve skutečnosti je rozdíl v elektrickém poli po průchodu prvním a posledním filtrov i několik řádů. Filtry byly voleny vždy v minimu mezi dvěma sousedními energetickými píky, poslední filtr zachycuje pouze poslední dvě vysoké harmonické frekvence zřetelné ve spektru.

6.4.5 Závislost spektra generovaného pulzu na délce budícího pulzu

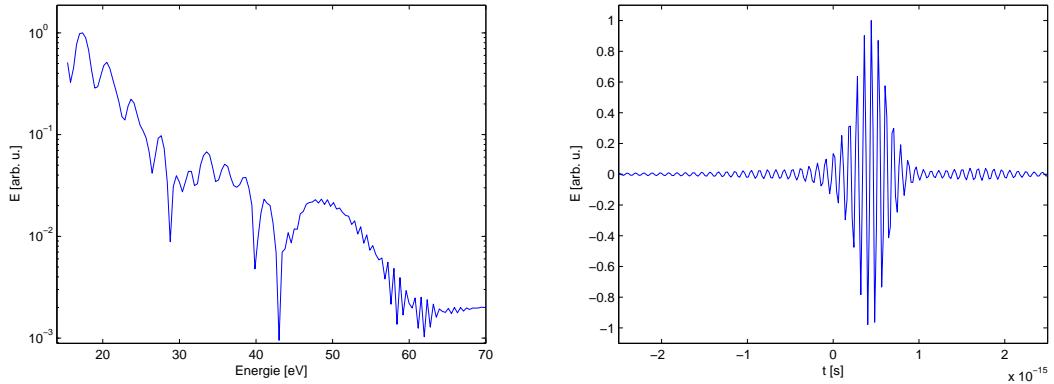


Obrázek 22: Spektrum vygenerovaného záření pro různě dlouhé budící pulzy, délka pulzu je uvedena v názvu jednotlivých grafů. Ostatní parametry budících pulzů jsou $I_0 = 1.5 \cdot 10^{18} \text{ Wm}^{-2}$, $z_0 = 5 \text{ mm}$ a $w_0 = 6 \cdot 10^{-5} \text{ m}$. Délka média $L = 1 \text{ cm}$.

Jak jsme zmínili v oddílu 3.2, jsou ve spektru v důsledku periodicity pole pouze liché harmonické, v případě velmi krátkých budících pulzů (viz oddíl 5.1) je situace odlišná, máme vygenerovaný pouze jeden impulz a očekáváme spíše spojité spektrum. Na obrázku 22 je znázorněno spektrum různě dlouhých budících pulzů a skutečně pro nejkratší 4fs pulz je spektrum v oblasti nejvyšších generovaných energií fotonů v podstatě spojité, pro 10fs už můžeme pozorovat málo zřetelné píky a pro nejdélší 20fs pulz už jsou píky zcela jasně pozorovatelné.

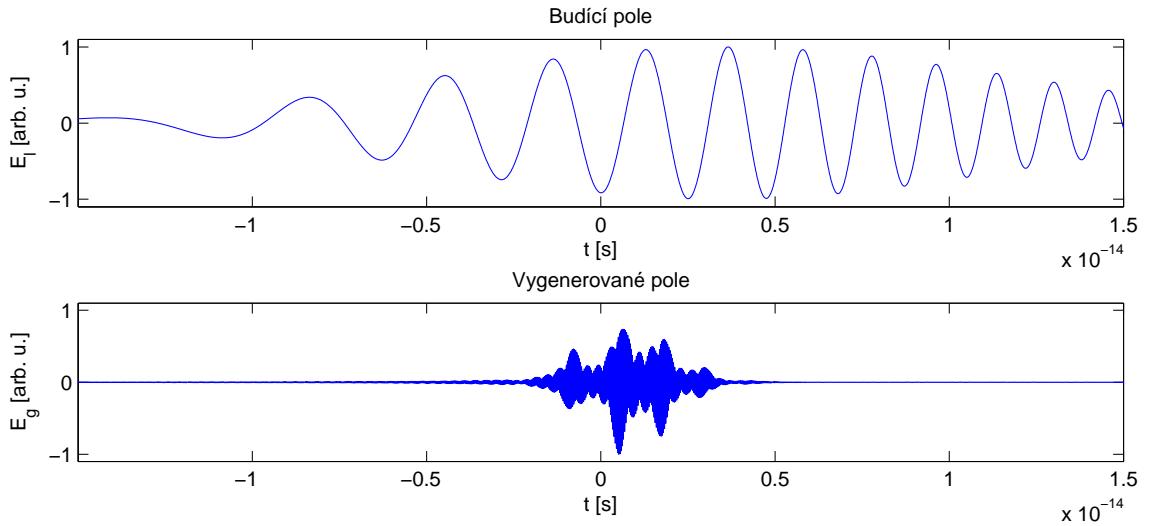
6.4.6 Generace jediného attosekundového impulzu krátkým budícím pulzem

V předchozích dvou oddílech jsme si představili vliv délky budícího pulzu na tvar spektra vygenerovaného záření a funkci spektrálních filtrov. Jak jsme zmínili v oddíle 5.1, je jedním ze způsobů generace jediného attosekundového impulzu použití spektrálního filtru v kombinaci s krátkým budícím pulzem. Tato situace je pro 3fs budící pulz znázorněna na obrázku 23, levý graf ukazuje spektrum vzniklého záření, pravý vytvořený impulz po průchodu spektrálním filtrem, délka tohoto impulzu je přibližně 280 as (FWHM).

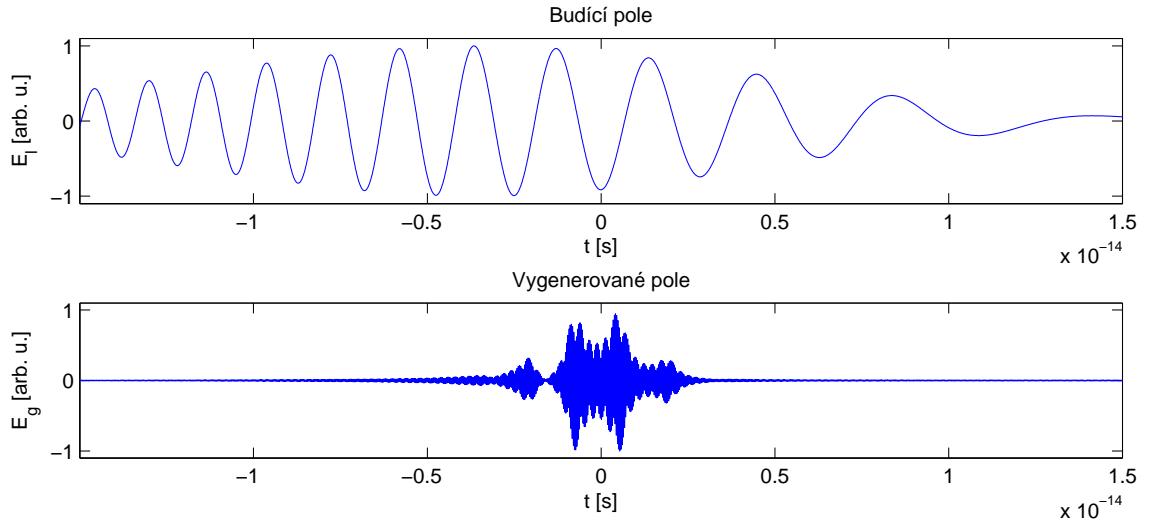


Obrázek 23: Generace jediného attosekundového impulzu. Vlevo je spektrum vygenerovaného záření, vpravo průběh vygenerovaného elektrického pole po průchodu filtrem $E_f = 43$ eV. Parametry budícího pulzu: $\tau_g = 3$ fs, $I_0 = 2 \cdot 10^{18}$ W m $^{-2}$, $z_0 = 0.5$ μm a $w_0 = 6 \cdot 10^{-5}$ m. Délka média $L = 1$ μm.

6.4.7 Chirpované budící pulzy



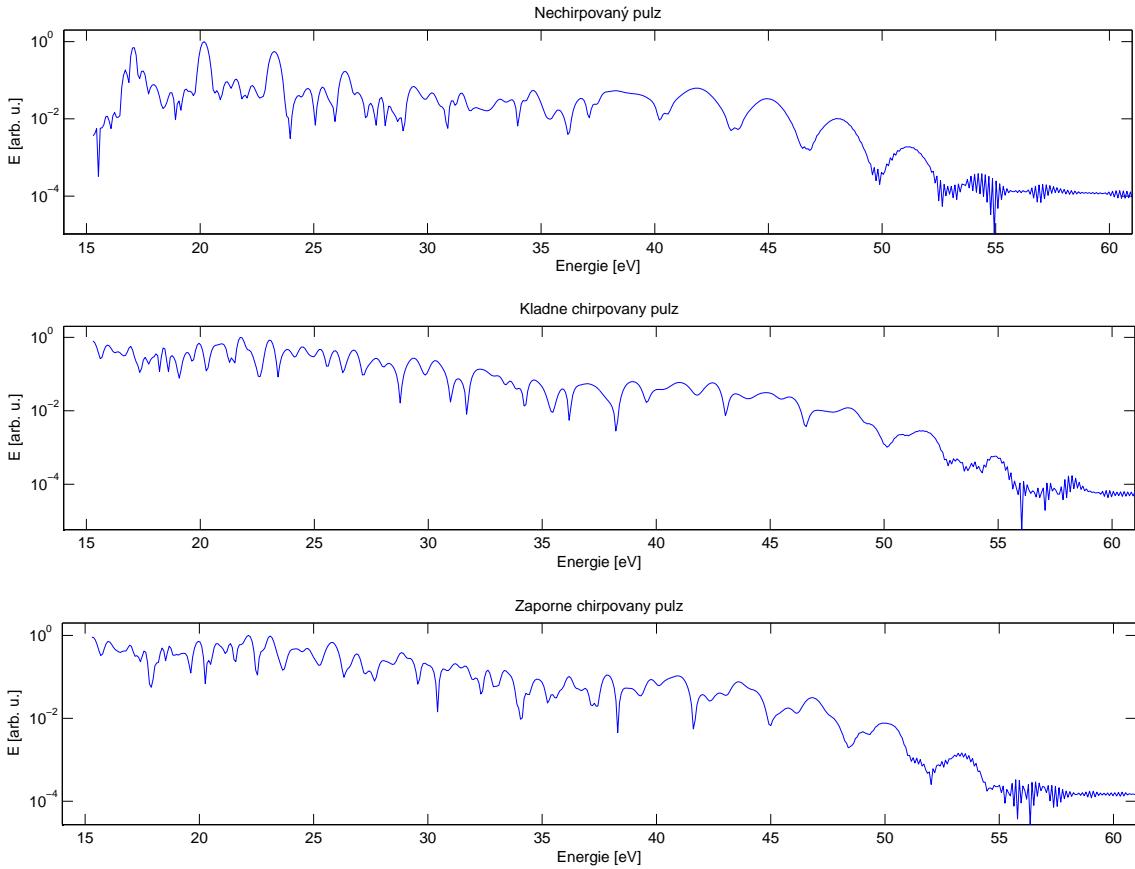
Obrázek 24: Pole vygenerované kladně chirpovaným pulzem. Parametry budícího pulzu: $\tau_g = 15$ fs, $I_0 = 5 \cdot 10^{18} \text{ W m}^{-2}$, $z_0 = 0.5 \mu\text{m}$, $w_0 = 8 \cdot 10^{-5} \text{ m}$ a $b_g = 6 \cdot 10^{28} \text{ s}^{-2}$. Délka média $L = 1 \mu\text{m}$. Pro vygenerované pole byl použit filtr $E_f = 118.2$ eV.



Obrázek 25: Pole vygenerované záporně chirpovaným pulzem. $b_g = -6 \cdot 10^{28} \text{ s}^{-2}$, ostatní parametry shodné v simulaci na obrázku 24. Pro vygenerované pole byl použit filtr $E_f = 115.8$ eV.

Záření vygenerované chirpovanými pulzy je znázorněno na obrázcích 24 a 25. Je třeba připomenout, že maximum obálky již není v $t = 0$. Jsou zobrazeny pouze impulzy odpovídající nejvyšším harmonickým ve spektru. Vidíme, že v případě kladně chirpovaného pulzu (obr. 24) vznikají tyto impulzy ještě před maximem intenzity budícího pulzu, pro negativně chirpovaný pulz vznikají až za ním. To odpovídá našemu očekávání, protože je v těchto oblastech větší *okamžitá vlnová délka*²⁵ a tedy i větší ponderomotivní potenciál U_p a tedy v této oblasti podle (36) mohou vznikat fotony s vyšší energií.

²⁵Pro elektrické pole $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega_0 t + \varphi(t))$ definujeme *okamžitou úhlovou frekvenci* $\omega(t) = \partial_t(\omega_0 t + \varphi(t))$. Okamžitá vlnová délka je $\lambda(t) = 2\pi c/\omega(t)$.



Obrázek 26: Spektrum vygenerovaného záření pro různě chirpované budící pulzy. Parametry budícího pulzu: $\tau_g = 15$ fs, $I_0 = 1.5 \cdot 10^{18} \text{ W m}^{-2}$, $z_0 = 2.5$ mm, $w_0 = 8 \cdot 10^{-5}$ m a parametr chirpu shora $b_g = 0, \pm 6 \cdot 10^{28} \text{ s}^{-2}$. Délka média $L = 1$ cm.

Na obrázku 26 je spektrum vygenerovaného záření pro různě chirpované budící pulzy. Vidíme, že pro chirpované pulzy jsou píky odpovídající jednotlivým vysokým harmonickým frekvencím širší. Je to způsobeno tím, že frekvence budícího pulzu se pomalu mění v jeho průběhu a proto se mění i poloha píků.

7 Závěr

Cílem této práce bylo prostudovat podmínky a fyzikální princip generace vysokých harmonických frekvencí intenzivního laserového pulzu v plynném prostředí a podmínky vzniku jediného attosekundového impulzu. Mezi potřebné teoretické znalosti patří popis svazku budícího laseru, který je proveden v 2. kapitole, dále mikroskopický model jednoatomové odezvy, který je představen v 3. kapitole a makroskopický model vzniku a šíření vzniklého elektromagnetického záření v plynném médiu, představený v 4. kapitole. V 5. kapitole jsou nastíněny možnosti vzniku pouze jediného attosekundového impulzu. Na základě těchto znalostí autor vytvořil autor počítacový model v programu MATLAB®, který je představen v 6. kapitole a jsou na něm ilustrovány některé příklady teorie probrané v předchozích kapitolách. Celému textu navíc předchází přehled v dnešní době používaných a studovaných zdrojů krátkovlnného záření, pro možnost zařazení generace vysokých harmonických frekvencí do širšího kontextu.

7.1 Výhled

Tato práce je jen úvodem do problematiky generace vysokých harmonických frekvencí a attosekundových impulzů a ani vytvořený model nepředstavuje maximum, čeho je v dnešní době možno dosáhnout. V podstatě se dá říci, že na každou approximaci lze provést nějakou korekci, kterou se více přiblížíme k realitě, ať to jsou zpřesnění vycházející z matematického modelu, či fenomenologické vycházející z již provedených experimentů. Z tohoto důvodu autor nepovažuje toto téma v žádném případě za vyčerpané a plánuje v něm pokračovat. Nejrychleji dosažitelné vylepšení se zatím jeví implementace dvoubarevného buzení ke generaci jednotlivých attosekundových impulzů zmíněné v 5.2.2 a vylepšení modelu chirpu. Další je korekce k započítání vyprazdňování základního stavu pomocí ADK modelu 3.6. Model zatím počítá pouze atomy vodíku, pro praktické použití je třeba přejít i k jiným prvkům. Logickým krokem je také přechod od vytvořeného jednodimenzionálního modelu k trojrozměrnému.

8 Použitá literatura

Monografie

- [1] CHANG, Z. *Fundamentals of Attosecond Optics*, 1. vyd., CRC Press, 2011
- [2] JOACHAIN, C. J., KYLSTRA, N. J., POTVLEGE R. M. *Atoms in intense laser fields*, 1. vyd., 580 s, Cambridge University Press, 2012
- [3] BLANK, J., EXNER, P., HAVLÍČEK, M. *Lineární operátory v kvantové fyzice*, 1. vyd., Praha, 680 s, Vydavatelství Karolinum, 1993
- [4] FORMÁNEK, J. *Úvod do kvantové teorie*, 2. vyd., Praha, 1000 s, Vydavatelství Academia, 2004
- [5] ATTWOOD, D. *Soft X-Rays and Extreme Ultraviolet Radiation*, 1. vyd., Cambridge, 472 s, Cambridge University Press, 1999
- [6] BOYD, R. W. *Nonlinear Optics*, 3. vyd., Burlington, 640 s, Academic Press, 2008
- [7] JAEGLÉ, P. *Coherent Sources of XUV Radiation*, 416 s, Springer, 2006

Články v odborných časopisech

- [8] CORDE, S., PHUOC, K. TA, LAMBERT, G., FITOUR, R., MALKA, V., ROUSSE, A. Femtosecond X-rays from Laser-Plasma Accelerators *Rev. Mod. Phys.* **85**, 1 (2013), 1-48
- [9] MALKA, J., FAURE, J., GAUDUEL, Y. A., LEFEBVRE, E., ROUSSE, A., PHUOC, K. T. Principles and applications of compact laser-plasma accelerators, *Nature Physics* **4** (2008), 447-453
- [10] BURIAN, T., CHALUPSKÝ, J., HÁJKOVÁ, V., BOHÁČEK, P., JUHA, L. LCLS (Linac Coherent Light Source) *Čs. čas. fyz.* **59** (2009), 357-361
- [11] CORKUM, P. B. Plasma perspective on strong-field multiphoton ionization, *Phys. Rev. Lett.* vol. **71** (1993), 1994-1997
- [12] LEWENSTEIN, M., BALCOU, PH., IVANOV, M. YU., L'HUILIER, A., CORKUM, P. B. Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields, *Phys. Rev.* (1994), 2117-2132
- [13] GOULIELMAKIS, E., UBERACKER, M., KIENBERGER, R., BALTUSKA, A., YAKOVLEV, V., SCRINZI, A., WESTERWALBESLOH, TH., KLEINEBERG, U., HEINZMANN, U., DRESCHER, M., KRAUSZ, F. Direct Measurement of Light Waves *Science* vol. **305** (2004), 1267-1269
- [14] GILBERTSON, S., FENG, X., KHAN, S., CHINI, M., WANG, H., MASHIKO, H., CHANG, Z. Direct measurement of an electric field in femtosecond Bessel-Gaussian beams *Optics letters* vol. **34** (2009), 2390-2392
- [15] FEIST, J., NAGELE S., PAZOUREK R., PERSSON E., SCHNEIDER B. I., COLLINS L. A., BURGDÖRFER, J. Probing electron correlation via attosecond XUV pulses in the two-photon double ionization of Helium *Phys. Rev. Lett.* vol. **103** (2009), 063002
- [16] HU, S. X., COLLINS, L. A. Attosecond pump probe: Exploring ultrafast electron motion inside an atom *Phys. Rev. Lett.* vol. **96** (2007), 073004
- [17] BRABEC, T., KRAUSZ, F. Intense few-cycle laser fields: Frontiers of nonlinear optics *Rev. Mod. Phys.* Vol. **72** (2000), 545-591

- [18] CORKUM, P. B., KRAUSZ, F. Attosecond science *Nature Physics* Vol. 3 (2007), p. 381-387
- [19] KRAUSZ, F., IVANOV, M. Attosecond physics *Reviews of Modern Physics* Vol. 81 (2009), p. 163-234
- [20] HERNÁNDEZ-GARCÍA, C., PÉREZ-HERNÁNDEZ, J. A., POPMINTCHEV, T., MURNANE, M. M., KAPTEYN, H. C., JARON-BECKER, A., BECKER, A., PLAJA, L. Zeptosecond High Harmonic keV X-Ray Waveforms Driven by Midinfrared Laser Pulses *Phys. Rev. Lett.* Vol. 111 (2013), 033002
- [21] FENG, S., WINFUL, H. G. Physical origin of the Gouy phase shift, *Optics letters* vol. 26 (2001), 485-487
- [22] BANDRES M. A., GUTIÉRREZ-VEGA, J. C. Ince-Gaussian modes of the paraxial wave equation and stable resonators, *Journal of the Optical Society of America A*, Vol. 21 (2004), 873-880
- [23] HORVÁTH Z. L., BOR, Zs. Focusing of femtosecond pulses having gaussian spatial distribution, *Optics Communications* 100 (1993), 6-12
- [24] SHAN, B., GHIMIRE, S., CHANG, Z. Generation of the attosecond extreme ultraviolet supercontinuum by a polarization gating, *Journal of modern optics* vol. 52 (2004), 277-283
- [25] AMMOSOV, M. V., DELONE, N. B., KRAÏNOV, V. P. Tunnel ionization of complex atoms and of atomic ions in an alternating electromagnetic field, *Sov. Phys. JETP*, vol. 64 (1986), 1191-1194

VŠ skripta

- [26] KUBEŠ, P. *Impulsní silnoproudé výboje a jejich diagnostika*, on-line skriptum , FEL ČVUT, 2004
<http://www.aldebaran.cz/studium/vyboje.pdf>
- [27] GALVEZ, E. J. *Gaussian Beams*, on-line skriptum, Colgate University, 2009
<http://www.colgate.edu/portaldatalimagegallerywww/98c178dc-7e5b-4a04-b0a1-a73abf7f13d5/imagegallery/gaussian-beams.pdf>
- [28] ŠTOLL, I., TOLAR, J. *Teoretická fyzika*, 2. vyd., 425 s, vydavatelství ČVUT, 1994
- [29] PYTLÍČEK, J. *Lineární algebra a geometrie*, 3. vyd., 122 s, Česká technika, 2008

Závěrečné práce

- [30] NEJDL, J. *X-ray Laser Seeded by High-order Harmonic Beam*, Diplomová práce ČVUT, FJFI (2009)
- [31] HORT, O. *High harmonic generation with high energy femtosecond pulses*, Disertační práce, Université de Bordeaux, École doctorale des Sciences Physiques et de l'ingénieur (2014)
- [32] CHALUPSKÝ, J. *Charakterizace svazků rentgenových laserů různých typů*, Disertační práce ČVUT, FJFI (2012)
- [33] WILLNER, A. *A High Repetition Rate XUV Seeding Source for FLASH2*, Disertační práce, Universität Hamburg (2011)
- [34] HAJNOVÁ, A. *Diagnostika laserových svazků*, Diplomová práce Univerzity Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta (2010)
- [35] ALBRECHT, M. *Rentgenové lasery vytvořené interakcí laseru s pevným terčem*, Bakalářská práce ČVUT, FJFI (2013)

Internetové zdroje

- [36] CATTIN, P. *Basics of X-ray: Principles of Medical Imaging*, on-line [14.7.2014]
http://miac.unibas.ch/PMI/01-BasicsOfXray-media/figs/Characteristic_Spectrum.png
- [37] LIGHTSOURCES.ORG *Light Source Facility Information*, on-line [5.7.2014]
<http://www.xfel.eu/projekt/kalender/>
- [38] EUROPEAN XFEL *European XFEL: Calendar*, on-line [5.7.2014]
<http://www.xfel.eu/projekt/kalender/>
- [39] JONES, R. V. *Classical Electromagnetic Fields-Beams: The Paraxial Wave Equation in Uniform Media*, on-line lecture notes
http://people.seas.harvard.edu/jones/ap216/lectures/ls_1/ls1_u3/ls1_unit_3.html
- [40] NIST (NATIONAL INSTITUTE OF STANDARDS AND TECHNOLOGY) *X-Ray Factor Attenuation and Scattering tables*, on-line [29.4.2014]
<http://physics.nist.gov/PhysRefData/FFast/html/form.html>
- [41] FOWLER M. *Graduate Quantum Mechanics Notes: Functions of a Complex Variable: Contour Integration and Steepest Descent*, on-line [29.4.2014]
<http://galileo.phys.virginia.edu/classes/751.mf1i.fall02/ComplexVariable.htm>
- [42] WIKIPEDIA *Method of steepest descent*, on-line [19.5.2014]
http://en.wikipedia.org/wiki/Method_of_steepest_descent

Dodatky

A Saddle point approximation

Tato metoda se yužívá k výpočtu integrálu typu

$$I_1 = \int_a^b f(x) e^{Ag(x)} dx, \quad (98)$$

pro $A \gg 0$, funkce $f, g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ nebo v n -rozměrném případě

$$I_n = \int_M f(x_1, \dots, x_n) e^{Ag(x_1, \dots, x_n)} d^n x, \quad M \subset \mathbb{R}^n, \quad (99)$$

$f, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Předpokládáme, že funkce g nabývá maxima v intervalu (a, b) , resp. uvnitř M . Tento případ lze dále zobecnit na funkce $f, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$, toto zobecnění je využito v 3.4. Nebudeme se tu zabývat zcela korektním zdůvodněním všech kroků, protože chceme pouze naznačit myšlenku výpočtu. Pro detailnější odvození vizte použitou literaturu [41, 42].

A.1 Jednorozměrný případ

Nyní k samotnému výpočtu v reálném případě. Předpokládáme, že funkce g nabývá maxima v intervalu (a, b) , resp. uvnitř M . Nyní se budeme zabývat jednorozměrným případem, bez újmy na obecnosti předpokládejme, že maxima se nabývá v 0 a $0 \in (a, b)$. Rozvineme Ag do Taylorovy řady

$$Ag(x) = Ag(0) + A \frac{g''(0)}{2} x^2 + A \frac{g'''(0)}{3!} x^3 + \dots + A \frac{g^{(m)}(0)}{m!} x^m + \dots, \quad (100)$$

funkce nabývá v 0 maxima, proto $g'(0) = 0$. Podobně je $f(x) = \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} x^k$. Můžeme tak psát

$$I_1 = e^{Ag(0)} \int_a^b \left(\sum_{k=0}^{+\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{k!} x^k \right) \exp \left(A \sum_{k=2}^{+\infty} \frac{g^{(k)}(0)}{k!} x^k \right) dx. \quad (101)$$

Použijeme substituci $x = \frac{y}{\sqrt{A}}$, dostaneme tak

$$I_1 = \frac{e^{Ag(0)}}{\sqrt{A}} \int_{\sqrt{A}a}^{\sqrt{Ab}} \left(f(0) + \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{f^{(k)}(0)}{A^{\frac{k}{2}} k!} y^k \right) \exp \left(g''(0)y^2 + \sum_{k=3}^{+\infty} \frac{g^{(k)}(0)}{A^{\frac{k}{2}-1} k!} y^k \right) dy, \quad (102)$$

v sumách uvnitř integrálu zanedbáme členy řádu $\mathcal{O}(A^{-\frac{1}{2}})$, dále předpokládáme ze znalosti integrálu Gaussovy funkce, že k integrálu bude přispívat především okolí maxima, proto se nedopustíme velké chyby, pokud položíme $\sqrt{A}a \approx -\infty$ a $\sqrt{Ab} \approx +\infty$.²⁶ Víme, že 0 je bodem maxima g , proto $g''(0) < 0$, celkem pro I_1 dostaneme

$$I_1 \approx f(0) \frac{e^{Ag(0)}}{\sqrt{A}} \int_{\mathbb{R}} e^{\frac{g''(0)}{2} y^2} dy = f(0) e^{Ag(0)} \sqrt{\frac{2\pi}{-Ag''(0)}}. \quad (103)$$

A.2 Vícerozměrný případ

Podobně jako v jednorozměrném případě rozvineme funkce do Taylorovy řady v bodě 0, kde nabývá g ostrého maxima,

$$g(x_1, \dots, x_n) = g(0, \dots, 0) + \sum_{k=2}^{+\infty} \sum_{\substack{(i_1, \dots, i_n) \in \mathbb{Z}_+^n \\ i_1 + \dots + i_n = k}} \frac{1}{i_1! \dots i_n!} \frac{\partial^k g(0, \dots, 0)}{\partial x_1^{i_1} \dots \partial x_n^{i_n}} \prod_{j=1}^k x_{i_j}^{i_j}. \quad (104)$$

²⁶V případě $a, b = \mp\infty$ se této chyby nedopouštíme.

Podobně rozvineme f . Další úvahy jsou obdobné jako u funkce jedné proměnné. Pomocí matice druhé derivace

$$\mathbb{B}_{ij} = \frac{\partial^2 g(0, \dots, 0)}{\partial x_i \partial x_j}, \quad i, j = 1, \dots, n \quad (105)$$

můžeme výsledný integrál psát ve tvaru

$$I_n \approx f(0, \dots, 0) \frac{e^{Ag(0, \dots, 0)}}{A^{\frac{n}{2}}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{\frac{1}{2}\mathbf{y} \cdot (\mathbb{B}\mathbf{y})} d^n y. \quad (106)$$

O matici \mathbb{B} víme, že je negativně definitní, proto existuje rozklad [29] $\mathbb{B} = \mathbb{P}^{-1}\mathbb{D}\mathbb{P}$, \mathbb{D} je diagonální matice s vlastními čísly matice \mathbb{B} na diagonále a \mathbb{P} je ortogonální matice, tj. $|\det \mathbb{P}| = 1$ a pro matici sdruženou platí $\mathbb{P}^* = \mathbb{P}^{-1}$. V integrálu provedeme substituci $\mathbf{z} = \mathbb{P}\mathbf{y}$. Protože je determinant transformační matice v absolutní hodnotě roven jedné, platí $d^n y = d^n z$. Pro skalární součin v exponentu platí

$$(\mathbb{P}^{-1}\mathbf{z}) \cdot (\mathbb{P}^{-1}\mathbb{D}\mathbb{P}\mathbb{P}^{-1}\mathbf{z}) = (\mathbb{P}^{-1}\mathbf{z}) \cdot (\mathbb{P}^*\mathbb{D}\mathbf{z}) = (\mathbb{P}\mathbb{P}^{-1}\mathbf{z}) \cdot (\mathbb{D}\mathbf{z}) = \sum_{i=1}^n d_i z_i^2, \quad (107)$$

d_i jsou diagonální prvky matice \mathbb{D} . Výsledek můžeme psát

$$I_n \approx f_0 \frac{e^{Ag_0}}{A^{\frac{n}{2}}} \prod_{i=1}^n \left(\int_{\mathbb{R}} e^{\frac{1}{2}d_i z_i^2} dz_i \right) = f_0 \frac{e^{Ag_0}}{A^{\frac{n}{2}}} \prod_{i=1}^n \sqrt{\frac{2\pi}{-d_i}} = f_0 \frac{(2\pi)^{\frac{n}{2}} e^{Ag_0}}{\sqrt{A^n |\det \mathbb{B}|}}, \quad (108)$$

označili jsme $g_0 = g(0, \dots, 0)$, $f_0 = f(0, \dots, 0)$ a využili rovnost $\prod_{i=1}^n d_i = \det \mathbb{D} = \det \mathbb{B}$ a znaménko determinantu pro sudá a lichá n .

A.3 Komplexní případ

Naše výsledky potřebujeme zobecnit na komplexní případ $f, g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$. Funkci g můžeme zapsat ve tvaru $g(\mathbf{x}) = g_1(\mathbf{x}) + i g_2(\mathbf{x})$ a g_1, g_2 jsou reálné funkce. Budeme se zabývat speciálním případem, kdy $g_1(\mathbf{x}) = 0, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$. zajímá nás tedy integrál

$$I_C = \int_{\mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) e^{iA g(\mathbf{x})} d^n x, \quad (109)$$

f je komplexní funkce, ale g již uvažujeme jako reálnou. Rádi bychom využili stejný postup jako v reálném případě. Nyní je ovšem třeba využít Gaussova integrálu

$$I_G = \int_{\mathbb{R}} e^{ia\xi^2} d\xi = \sqrt{\frac{i\pi}{a}}, \quad a \in \mathbb{R} \setminus \{0\}. \quad (110)$$

Je zřejmé, že se v tomto výsledku nelze jednoduše odvolat na reálný případ. Naznačíme tedy důkaz platnosti této rovnosti. Přejdeme k integraci v komplexním oboru. Díky symetrii se stačí omezit na polovinu $x > 0$ a integrál zapíšeme ve tvaru

$$\frac{1}{2} I_G = \lim_{R \rightarrow +\infty} \int_{\gamma_R} e^{iaz^2} dz, \quad \gamma_R = \{0 < x < R, y = 0\}, \quad (111)$$

$z = x + iy$ je nová komplexní proměnná. Protože je e^{iaz^2} holomorfní funkce použijeme Cauchyovu větu, podle které je $\oint_{\gamma} e^{iaz^2} dz = 0$, γ je křivka spojující vrcholy trojúhelníka²⁷ $(0, 0)$, $(R, 0)$, (R, R) . Volíme orientaci křivky proti směru pohybu hodinových ručiček, dostaneme tak rovnost

$$\int_{\gamma_R} e^{iaz^2} dz = - \int_{(R, R)}^{(0, 0)} e^{iaz^2} dz - \int_{(R, 0)}^{(R, R)} e^{iaz^2} dz. \quad (112)$$

²⁷Volba trojúhelníka závisí na znaménku a , my jsme udělali volbu pro $a > 0$, je to kvůli konvergenci následujících integrálů. Pro $a < 0$ bychom zaměnili vrchol (R, R) za $(R, -R)$.

Pro první integrál na pravé straně dostaneme při parametrizaci $\gamma_1 = \{x = y = R - t; 0 < t < R\}$:

$$\int_{(R,R)}^{(0,0)} e^{iaz^2} dz = \int_0^R e^{ia((R-t)+i(R-t))^2} (-1 - i) dt = -(1 + i) \int_0^R e^{-2as^2} ds, \quad (113)$$

v poslední úpravě jsme substituovali $s = R - t$, pro druhý dostaneme odhad

$$\left| \int_{(R,0)}^{(R,R)} e^{iaz^2} dz \right| \leq \int_0^R \left| e^{ia(R+it)^2} i \right| dt \leq \int_0^{+\infty} e^{-2aRt} dt = \frac{1}{2aR} \xrightarrow{R \rightarrow +\infty} 0. \quad (114)$$

Odtud můžeme psát výsledek²⁸

$$I_G = 2 \lim_{R \rightarrow +\infty} (1 + i) \int_0^R e^{-2at^2} dt = \frac{1+i}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\pi}{a}} = \sqrt{\frac{i\pi}{a}}. \quad (115)$$

Nyní přistoupíme k výpočtu integrálu (109), nebudeme již opakovat úpravy analogické těm v A.2 a použijeme stejné značení, dostaneme tak

$$I_C = \frac{f_0 e^{Ag_0}}{A^{\frac{n}{2}}} \prod_{i=1}^n \left(\int_{\mathbb{R}} e^{\frac{i}{2}d_i z_i^2} dz_i \right) = \frac{f_0 e^{Ag_0}}{A^{\frac{n}{2}}} \prod_{i=1}^n \sqrt{\frac{i2\pi}{d_i}}, \quad (116)$$

je třeba upozornit, že vzorec $\sqrt{a}\sqrt{b} = \sqrt{ab}$ platí pouze pokud je alespoň jedno z čísel a, b nezáporné! Proto je třeba dbát zvýšenou pozornost na výpočet poslední odmocniny s přihlédnutím ke konvenci uvedené v poznámce. Proto jsme také vzorec neupravili do tvaru s determinantem, ale ponechali jsme tvar s vlastními čísly matice \mathbb{B} . Dále je vhodné si povšimnout, že v komplexním případě tento výsledek platí pro funkce, které mají v 0 maximum, minimum nebo sedlový bod.

²⁸Výraz \sqrt{i} není jednoznačně definován, tedy je třeba pracovat opatrně v případech, kdy by tím mohl být ovlivněn výsledek. V této práci užíváme $\sqrt{i} = (1+i)/\sqrt{2}$ a $\sqrt{-i} = (1-i)/\sqrt{2}$.

B Atomové jednotky (a.u.)

V těchto jednotkách je číselná hodnota následujících veličin definována rovna jedné:

$$\hbar = e = m_e = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} = 1. \quad (117)$$

Z těchto vztahů plyne i číselná rovnost následujících konstant, kterou je vhodné zmínit, protože se využívá v této práci

$$a_0 = 2I_P = \alpha c = 1, \quad (118)$$

α je konstanta jemné struktury, a_0 Bohrův poloměr, c rychlosť světla ve vakuu a I_P je ionizační energie atomu vodíku v základním stavu. V tabulce 1 jsou uvedeny transformační vztahy mezi systémy SI a a.u.²⁹

Veličina	Jednotka	Převodní vztah a.u.
Energie	J	1 a.u.= $4.35974 \cdot 10^{-18}$ J
Energie	eV	1 a.u.= 27.2114 eV
Hmotnost	kg	1 a.u.= $9.10938 \cdot 10^{-31}$ kg
Náboj	C	1 a.u.= $1.60218 \cdot 10^{-19}$ C
Elektrické pole	V · m ⁻¹	1 a.u.= $5.14221 \cdot 10^{11}$ V · m ⁻¹
Čas	s	1 a.u.= $2.41888 \cdot 10^{-17}$ s
Délka	m	1 a.u.= $5.29177 \cdot 10^{-11}$ m
Rychlosť	m · s ⁻¹	1 a.u.= $2.18769 \cdot 10^6$ m · s ⁻¹

Tabulka 1: Převodní vztahy mezi veličinami v atomových jednotkách (a.u.) a soustavou SI.

²⁹Navíc je uvedena i energie v eV, protože se tato jednotka také běžně používá.

C Zdrojový kód programů

Zdrojový kód programu pro výpočet vzniku vysokých harmonických frekvencí v médiu.

```
%PROPAGATION OF THE GENERATED PULSE IN A DISPERSIVE MEDIUM

clear all, close all, clc
c=299792458; mu0=4*pi*1e-7; eps0=1/mu0/c^2; alph=7.297352569824e-3; hbar=1.054571726e-34;
echarge=1.602176565e-19; elmass=9.10938291e-31; hbar=6.58211928e-16; %alph - Fine structure constant, hbar= Planck constant in eV
k_B=1.3806488e-23; %Boltzmann constant

re=echarge^2/4/pi/eps0/elmass/c^2; %classical electron radius

% MEDIUM PROPERTIES
L=1e-2; %length of the medium (m)
p=50e-3; %pressure of gas (bar)
T=20; %temperature (°C)

% GAUSSIAN LASER BEAM PROPERTIES/PLANE WAVE PROPERTIES
lambda_G=800e-9; % laser wavelength (m)
T_G=15e-15; % pulse length (s) [FWHM length]
I0=1.5e18; % Maximum intensity (W/m^2) %2e18 %5e18 dobrý
w_0=8e-5; %laser beam waist (m)
z_0=L/2; %focal point of laser beam coordinate in medium, medium begins at z=0 (m)
phi_sh=0; %phase shift
b=0;% 0.02e30; % chirp (s^-2)

% CONSTANTS FOR NUMERIC CALCULATIONS
%Propagation in medium
N=25; %number of steps %25
%One-atom response
FixedN2=0; %1 - Fixed number of steps, 0 - Number of steps is calculated using cutoff energy
N2=25000; %half of the number of steps, N2+1 is zero time (ignored if FixedN2=0)
m=15; %Computing X over 'm' periods X=int_0^inf dtau ~ X=int_0^(m*T_LS), LS - laser field %2
FrL=3.5; %Time of the computation frame lenght in pulse lenght unit
EmL=1.7; %Maximal energy captured in Fourier transform in cutoff energy unit (E_cutoff=1) %1.3 1.7 2
P1E=0; %logical variable for plotting laser field in the last cell

%PLANE WAVE OR GAUSSIAN BEAM
Gauss=1; %1 - Gaussian beam, 0 - plane wave
%for a plane wave is redundant arguments ignored

%number of steps with cutoff energy use
I_P=4.35974e-18/2; %ionization potential of hydrogen atom (J)
U_p=(echarge*lambda_G/pi)^2*mu0*I0/8/c/elmass; %ponderomotive potential (J)

E_cutoff=I_P+3.17*U_p; %(J)
if not(FixedN2)
    E_max=EmL*E_cutoff; %(J)
    dt=pi*hbar/E_max; %(s)
    N2=round(FrL*T_G/dt/2);
end

%computations for pulse propagation in medium
T=T+273.15; %temperature in Kelvins
p=p*1e5; %pressure in Pascals

z=linspace(L/N/2,L-L/N/2,N); %z grid %%zero point of the z axis is in z(1)-dz/2
dz=z(2)-z(1); %elementar lenght
z_R=pi*w_0^2/lambda_G; %Rayleigh lenght of laser beam (m)
z_c=-z_0+dz/2; %z coordinate of z(1) in laser beam waist coordinates coordinates with (z_0=0)

NA=p/k_B/T; %number of atoms in unit volume
NA_S=NA*dz;%number of atoms which interact in elementar volume, assume unity surface
%NA=NA*dz*4*pi*r^2;

if Gauss

    %Electric field in the first medium cell
    phi=atan(z_c/z_R); %phase shift to Gouy formula
    w=w_0*sqrt(1+(z_c/z_R)^2); %laser beam waist

    dipolpom=dipol(phi+phi_sh,w_0/w,lambda_G,T_G,I0,b,N2,m,FrL,0);
    E0=dipolpom(1,:); %field generated in one-atom model, in frequency domain [V/m/s]
    M=length(E0); %number of steps in E

    o=dipolpom(2,:); %omega grid of E0
    lambda=2*pi*c./o ; %lambda grid of E
    Enrg=hbar*E0; %Energy grid of E in [eV]


```

```

loadcoef; %dipersion and absorption coefficients

E0=NA_S*EO; %EO multiplied by number of the interacting atoms in elementar volume
E=E0;

for i=2:N
    z_c=z_c+dz;
    phi=atan(z_c/z_R);
    w=w_0*sqrt(1+(z_c/z_R)^2);
    if i==N %Plotting of electric field in the last cell
        PLE=1;
    end
    dipolpom=dipol(phi+phi_sh,w_0/w,lambda_G,T_G,I0,b,N2,m,FrL,PLE);
    EO=dipolpom(1,:); %field generated in one-atom model, in frequency domain [V/m/s]
    EO=NA_S*EO;
    E=E.*en+EO;
    E(isnan(E))=0;
end

clear dipolpom

else

dipolpom=dipol(phi_sh,1,lambda_G,T_G,I0,b,N2,m,FrL,1);
EO=dipolpom(1,:); %field generated in one-atom model, in frequency domain [V/m/s]
M=length(EO); %number of steps in E

o=dipolpom(2,:); %omega grid of EO
lambda=2*pi*c./o ; %lambda grid of E
Enrg=hbareV*; %Energy grid of E in [eV]
clear dipolpom;

loadcoef;

EO=NA_S*EO;
E=E0;

for i=2:N
    E=E.*en+EO;
    E(isnan(E))=0;
end

end

% highpass spectral filter
E(Enrg<15.25)=0; %15.25

%OUTPUTS
%%

E_cutoff=E_cutoff/echarge; %cutoff energy in eV

figure(2) %Spectrum of generated field
% for harmonic order x-grid: o_G=2*pi*c/lambda_G; semilogy(o/o_G,norma(abs(E)), xlabel('N [-]')
semilogy(Enrg,norma(abs(E))), ylim([0, 2]), xlabel('Energie [eV]'), ylabel('E [arb. u.]'), title('Spektrum vygenerovaného impulzu');

%vertical line for E_cutoff
%hx = graph2d.constantline(E_cutoff, 'LineStyle',':', 'Color',[.7 .7 .7]);
%changedependvar(hx,'x');

%Tramsform E to time domain
IFE=ifft([E,conj(fliplr(E(2:M)))]);
tbase=linspace(-FrL/2*T_G,FrL/2*T_G,length(IFE));
figure(1)
subplot(2,1,2);
plot(tbase,norma(IFE)), ylim([-1.1, 1.1]), title('Vygenerované pole'), xlabel('t [s]'), ylabel('E_g [arb. u.]'); %legend('E_g');

Zdrojový kód programu pro výpočet jednoatomové odezvy.

function [ FD_ogrid ] = dipol(phi,W_G,lambda,T,I0,b,M,m,FrL,PLE)
%ONE ATOM RESPONSE gives value of dipole acceleration coordinate in angular frequency domain
% Output: First line is a dipole acceleration coordinate, second angular freq. grid
% Input phi - Carrier envelope phase (rad)
% W_G - Gaussian waist factor (-)
% lambda - laser wavelength (m)
% T - pulse length (s) [FWHM length]

```

```

% I0 - Maximum intensity (W/m^2)
% b - chirp (s^-2)
% M - half of the number of steps, M+1 is the zero time
% m - Computing X over 'm' periods X=int_0^+infinity dtau ~ X=int_0^(m*T_LS), LS - laser field, X - electron coordinate
% FrL - Time frame lenght in pulse lenght unit
% PLE - variable for plotting electric field in output

%Physical constants
c=299792458; mu0=4*pi*1e-7; eps0=1/mu0/c^2; alph=7.297352569824e-3; echarge=1.602176565e-19; elmass=9.10938291e-31; %alph - Fine structure constant

%Numeric calculation constants
N=2*M+1;
t=linspace(-FrL/2*T,FrL/2*T,N); % time grid [-t,t]
tau=linspace(0,FrL*T,N); % time grid [0,2t]
tpom=t(2)-t(1); %time step of integration for the rectangle method use

% Laser beam properties
E0=W_G*sqrt(2*I0/eps0/c); % maximum of the electric field multiplied by Gaussian waist factor W_G
a=-2*log(2)*(1/T)^2;
o=2*pi*c/lambda; % omega

%E=E0*exp((a+1i*b)*t.^2) .* exp(1i*(o*t + phi));
A=E0/1i/o * exp((a+1i*b)*t.^2) .* exp(1i*(o*t + phi));
E=-E0/1i/o * (2*(a+1i*b)*t+1i*o) .* exp((a+1i*b)*t.^2) .* exp(1i*(o*t + phi)); %E=-dA/dt
E=real(E);
A=real(A);

%PLOTING ELCTRIC FIELD IN THE LAST CELL
if PLE
figure(1)
subplot(2,1,1);
plot(t,norma(E)), ylim([-1.1, 1.1]), title('Budíci pole'), xlabel('t [s]'), ylabel('E_1 [arb. u.]');
end

%TRANSFORMING ALL QUANTITIES TO ATOMIC UNITS
EFS=5.1422e11; % 1*a.u.=EFS*V/m
TIME=2.4188e-17; % 1*a.u.=TIME*s
VECPOT=EFS*TIME; % 1*a.u.=EFS/TIME*SI
LENGTH=5.29177e-11; %1*a.u.=LENGTH*m
ENERGY=4.35974e-18; %1*a.u.=ENERGY*j

tau=(1/TIME)*tau;
t=(1/TIME)*t;
T=T/TIME;
tpom=(1/TIME)*tpom;
E=(1/EFS)*E;
A=A/VECPOT;
lambda=lambda/LENGTH;
c=1/alph;

Ip=0.5; %Ionization potential of hydrogen atom in a.u.

%Computing of (I A dt) using rectangle method
IA=Primint(A,tpom); %Primitive function to A

A2=A.^2; %function A^2 for numeric integration
%Computing of (I A^2 dt) using function Prim
IA2=Primint(A2,tpom); %Primitive function to A^2

eps=tpom/1000; %epsilon from the Saddle point approximation
X=zeros(1,M+1); %electron coordinate
Xpom=0;%variable for computing X for every t in the time grid

%0=M; %0 denotes upper limit in X integral, (M for half period - [0,t])
O=ceil(m*lambda/c/tpom); %T_LS=lambda/c (LS-laser field) O=m*T_LS/tpom %computing integral over m periods

%computing of X integral using the rectangle method
for i=1:N %X coordinate for these times

    dx2=0;
    for j=2:0
        dx1=dx2;
        if (i-j)>0
            pomp=-(IA(i)-IA(i-j))/tau(j); %stationary momentum for every cycle
            dx2=(sqrt(pi/(eps-1i*tau(j)/2)))^3 *conj(dm((pomp+A(i))))*exp(1i*Act(i,j,IA2,IA,Ip,tau,M))*E(i-j)*dm((pomp+A(i-j)));
        else
            dx2=0;
        end
    end
end

```

```

        end
Xpom=Xpom+tpom*(dx1+dx2)/2;
end

X(i)=Xpom;
Xpom=0;
end
clear pomp;
clear Xpom;
clear dx1;
clear dx2;
%clear 0;

X=2*imag(X);

%TRANSFORMING QUANTITIES BACK TO SI
Ip=Ip*ENERGY;
E=EFS*E;
T=T*TIME; %pulse length at FWHP
T_L=T*FrL; %time frame length
t=t*TIME;

%FOURIER TRANSFORM OF ELECTRON COORDINATE
FX=fft(X)/N;
f_samp=N/T_L; %sample frequency [1/s]
f=f_samp*linspace(0,1,N); %frequency grid [1/s]
ogrid=2*pi*f; %angular frequency grid [1/s]
FD=-ogrid.^2.*FX; %Fourier transform of electron acceleration (F[dif^2(x)](w)=-w^2*F[x](w))
%FD_mag=2*abs(FD); %amplitude of FX independent on N

%OUTPUTS
%%
FD_ogrid=[FD(:,1:M);ogrid(:,1:M)];

end

```

Program pro načtení koeficientů f_1 a f_2 pro výpočet absorpce a disperze

```

load('coef_f1f2.mat'); %value of f1 and f2 factors is saved in variable f1f2, first row - Energy, second - f1 value, third f2 value
f1f2=f1f2';
f1=interp1(f1f2(:,1),f1f2(:,2),Enrg);
f2=interp1(f1f2(:,1),f1f2(:,3),Enrg);
n=1-re*NA/2/pi*lambda.^2.*(f1+ii*f2); %index of refraction
en=exp(-ii*dz/c*(o.^(n-1))); %E modification factor

```