



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Marek Kuchař

**Klasický a kvantový model popisující
1D dynamiku volného elektronu
v ponderomotorickém potenciálu
optické záznějové vlny**

Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Martin Kozák, Ph.D.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: FP

Praha 2022

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Rád bych poděkoval vedoucímu práce, RNDr. Martinu Kozákovi, Ph.D., za odborné vedení, doporučování vhodné literatury, poskytování cenných rad a zejména za okamžitou komunikaci a velikou vstřícnost.

Název práce: Klasický a kvantový model popisující 1D dynamiku volného elektronu v ponderomotorickém potenciálu optické zánějové vlny

Autor: Marek Kuchař

Katedra: Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Martin Kozák, Ph.D., Katedra chemické fyziky a optiky

Abstrakt: Nepružný rozptyl volně se šířících elektronů na světelných vlnách je v současné době předmětem výzkumu díky možným aplikacím v pokročilých metodách elektronové mikroskopie a difrakce. Typicky je tato interakce popisována v režimu, kdy se rychlost elektronu během interakce téměř nezmění. V této práci se zabýváme popisem dynamiky elektronů v interakčním potenciálu generovaném optickou vlnou za hranicemi této aproximace. V klasickém modelu interakce řešíme nelineární pohybovou rovnici a v rámci kvantového modelu se zabýváme popisem dynamiky pomocí parabolické aproximace potenciálu, ale také studujeme evoluci vlnové funkce volného elektronu v plném periodickém potenciálu. Pomocí numerických simulací na základě analytických výsledků následně ukážeme očekávaný vývoj spektra elektronů během interakce.

Klíčová slova: Ponderomotorický potenciál, lineární harmonický oscilátor, Schrödingerova rovnice, vlnová funkce

Title: Classical and quantum model of 1D dynamics of free electron in ponderomotive potential of an optical beat wave

Author: Marek Kuchař

Department: Department of Chemical Physics and Optics

Supervisor: RNDr. Martin Kozák, Ph.D., Department of Chemical Physics and Optics

Abstract: Inelastic scattering of freely propagating electrons on light waves is currently a studied topic because of potential applications in advanced electron microscopy and diffraction. The interaction is typically described using an approximation, in which we assume that the electron's velocity nearly does not change during the interaction. In this thesis we aim to describe the dynamics of electrons in an interaction potential generated by an optical wave beyond this regime. In classical description we solve the nonlinear equation of motion and while addressing the problem using quantum mechanical description we first use parabolic approximation of the interaction potential and then we also study the evolution of a free electron wavefunction in a full periodic potential. Using numerical simulations we show the expected evolution of the electron spectra during the interaction, based on analytical solutions.

Keywords: Ponderomotive potential, linear harmonic oscillator, Schrödinger equation, wave function

Obsah

Úvod	2
1 Rozptyl nabité částice na ponderomotorickém potenciálu	3
1.1 Kapitův-Diracův efekt	3
1.2 Experimentální kontext	3
1.3 Uvažované 1D zjednodušení	5
1.4 Nerelativistická ponderomotorická síla monofrekvenčního oscilujícího pole	6
1.5 Odvození pro případ superpozice jednoduchých polí	7
1.6 Klasický versus kvantový přístup	12
2 Klasický model	13
2.1 Analytické řešení pohybové rovnice	13
2.2 Vlastnosti řešení	17
2.3 Teoretické předpovědi pro dynamiku elektronů	19
2.4 Simulace časového vývoje pro konkrétní fyzikální parametry	22
3 Kvantový model	28
3.1 Popis dynamiky kvantového systému	28
3.2 Parabolická aproximace potenciálu v jedné prostorové periodě	29
3.3 Znázornění evoluce v jedné periodě a srovnání s klasickým řešením	31
3.4 Aplikace Blochova teoremu na plný periodický potenciál	35
3.5 Interpretace a znázornění evoluce ostré hladiny hybnosti	38
Závěr	40
Seznam použité literatury	42

Úvod

V počátcích kvantové mechaniky přišli Kapitza a Dirac s teoretickým popisem jevu, ve kterém elektronové vlny difragují na intenzitní mřížce formované stojatou elektromagnetickou vlnou ve vakuu (Kapitza a Dirac, 1933). Prokazatelné experimentální ověření si ale muselo počkat na vynález vysoce intenzivního koherentního zdroje světla, kterým je laser. Interakce elektronů se stojatou optickou vlnou je zprostředkována pomocí ponderomotorického potenciálu, který ovlivňuje pohyb nabitě částice v rychle oscilujícím nehomogenním elektromagnetickém poli. V kontextu plně kvantového popisu interakce elektronu se stojatou vlnou bychom hovořili o stimulovaném Comptonově rozptylu. Tento koncept byl prezentován v původní práci, která obsahuje odvození Kapitzyova-Diracova efektu, a jedná se o proces, při kterém elektron absorbuje foton z první vlny a následně emituje foton do vlny druhé, která se společně s první skládá ve stojatou vlnu.

S rozvojem laserové techniky se stalo předmětem zájmu také studium nepružného rozptylu elektronů na světelných vlnách. Existují totiž práce, které popisují a experimentálně demonstrují, že je pomocí nepružného rozptylu elektronů na ponderomotorickém potenciálu možno vytvářet ultrakrátké elektronové pulzy (Kozák a kol., 2018a), (Hilbert a kol., 2009). Potenciální aplikace takových pulzů v pokročilých metodách elektronové difrakce a mikroskopie by umožňovaly vizualizaci fyzikálních procesů na attosekundových (10^{-18} s) časových škálách, jako např. dynamiky elektronů v atomech, molekulách a pevných látkách.

Tato práce se zabývá studiem nerelativistické dynamiky volného elektronu v ponderomotorickém potenciálu za zmíněného nepružného režimu interakce. V první kapitole se blíže podíváme na podstatu této interakce jakožto zobecnění původního Kapitzyova-Diracova efektu. Krátce shrneme současné experimenty a popíšeme konkrétní uspořádání, které nám umožní studovat časový vývoj pouze v 1D přiblížení. V tomto uspořádání odvodíme tvar ponderomotorického potenciálu, který je generován optickou záznějovou vlnou, jež se vůči laboratorní soustavě pohybuje nenulovou rychlostí.

Pro odvození tvaru potenciálu budeme v rámci klasického modelu řešit nelineární pohybovou rovnici ve snaze obdržet analytický vztah pro trajektorii rozptýleného elektronu. Analytické řešení nám umožní popsat některé zajímavé aspekty trajektorií, jako jsou například perioda a maximální možná změna kinetické energie elektronu během interakce. V kvantovém modelu se nejprve podíváme na situaci, ve které je vhodné použít tzv. parabolickou aproximaci odvozeného potenciálu, tedy nahrazení skutečného tvaru parabolou v blízkosti minima. Problém tak efektivně převedeme na fyzikální systém lineárního harmonického oscilátoru, pro který známe analytické řešení. Následně se budeme ještě věnovat řešení časové Schrödingerovy rovnice pro nezjednodušený tvar ponderomotorického potenciálu při uvážení počátečního stavu elektronu ve tvaru rovinné vlny. Výsledky obdržené zmíněnými postupy rovněž numerickými metodami vizualizujeme, abychom kvantitativně srovnali jejich předpovědi.

1. Rozptyl nabité částice na ponderomotorickém potenciálu

1.1 Kapitův-Diracův efekt

Původní koncept, který pokládá teoretický základ problematice studované v této práci, je obsažen v článku (Kapitza a Dirac, 1933). Zjednodušeně lze říct, že Kapitza a Dirac přišli s ideou difrakce elektronových (de Broglieho) vln na intenzitní mřížce formované stojatou elektromagnetickou vlnou v analogii s klasickými experimenty difrakce světla na prostorově periodické mřížce (např. krystalu). Role hmoty a záření jsou tak do jisté míry oproti klasickému difrakčnímu experimentu vyměněny. Klasicky se časově středovaná interakce elektronu se stojatou elektromagnetickou vlnou popisuje skrze působení síly spojené s tzv. ponderomotorickým potenciálem, kterému se budeme věnovat později v této kapitole. Původní schéma experimentu bylo takové, že urychlené elektrony nalétávaly mezi zrcadlo a čočku, kde byla vytvořena (alespoň lokálně v blízkosti zrcadla) stojatá vlna od zdroje světla, který čočku osvětloval. Část elektronů se pak místo přímého průchodu stojatou vlnou měla odchylovat od původního směru dle Braggova zákona (kde perioda „mřížky“ je ekvivalentní polovině vlnové délky stojaté vlny). Nicméně již v původním článku Kapitza a Dirac uvedli, že pomocí dobové techniky bude experimentální ověření velmi obtížné.

Místo uvažování elektronu procházejícího polem stojaté vlny byl popis konstruován kolem faktu, že elektron interaguje se dvěma protichůdně se šířícími vlnami o stejných frekvencích. Každá z vln by tak v kvantovém obraze indukovala přechod, ve kterém by elektron absorboval foton a znovu emitoval v libovolném směru, v důsledku čehož by došlo ke změně jeho hybnosti a on byl vychýlen od původní dráhy. V případě obou vln působících zároveň byl ale v práci (Kapitza a Dirac, 1933) prezentován koncept stimulovaného Comptonova rozptylu, kdy elektron absorbuje foton z jedné vlny, ale místo spontánního emitování je opětovná emise stimulována existencí druhé vlny, tedy směr emise přestává být libovolný. Nicméně i v tomto případě zůstává celková energie elektronu zachována a jedná se tak o pružný rozptyl. Odvození pravděpodobnosti stimulovaného Comptonova rozptylu bylo důvodem, proč autoři usoudili, že bude velmi obtížné efekt s tehdejšími zdroji světla pozorovat (musíme si uvědomit, že první laser byl použit až v roce 1960, viz (Maiman a kol., 1960)). S použitím parametrů pro světlo rtuťové výbojky bylo odvozeno, že podíl difragovaných elektronů oproti původnímu svazku bude přibližně 10^{-14} . S moderní laserovou technikou je ale pozorování elektronů difragovaných na stojaté vlně možné, jak se lze přesvědčit z mnoha prací, např. (Freimund a kol., 2001).

1.2 Experimentální kontext

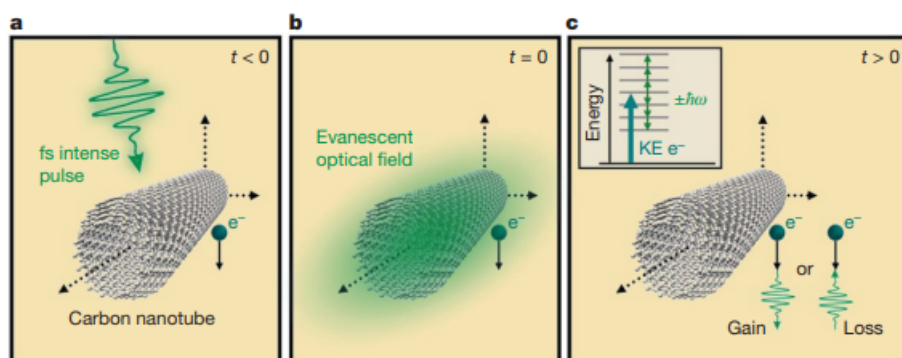
V následujících částech se budeme zabývat převážně formálním odvozením ponderomotorického potenciálu, který v klasickém a zjednodušeném kvantovém (semiklasickém) modelu řídí interakci. V této části ale nejprve shrneme některé

důležité aspekty experimentální situace, kterou budeme v dalších kapitolách teoreticky modelovat, a zmíníme aplikační možnosti kontrolovaného rozptylu elektronů na ponderomotorickém potenciálu. Opřeme se zejména o práci M. Kozáka, která se zabývá zobecněním diskutovaného Kapitzyova-Diracova efektu na nepružný rozptyl elektronů na ponderomotorickém potenciálu záznějové vlny, která v laboratorní soustavě není stojatá. Hlavní koncept najdeme v kompaktní formě např. v článku (Kozák a kol., 2018a). Materiály zabývající se „příbuznou“ problematikou ale nejsou ojedinělé, dalším příkladem může být práce S. A. Hilberta a kol. (Hilbert a kol., 2009), ve které je prezentován koncept temporální („časové“) čočky sloužící k fokusaci a zesílení ultrakrátkých elektronových pulzů. Princip čočky je rovněž založen na interakci elektronů s ponderomotorickým potenciálem. Ve zmíněných pracích bylo popsáno (a experimentálně demonstrováno), jak lze pomocí nepružné interakce elektronového svazku s optickou vlnou generovat attosekundové (10^{-18} s) elektronové pulzy.

Takto krátké pulzy by měly velký aplikační přínos, jelikož zatímco dynamiku strukturních změn na atomových škálách je možné vizualizovat pomocí pikosekundových (10^{-12} s) a femtosekundových (10^{-15} s) elektronových pulzů, rychlejší procesy (např. dynamika elektronů v atomech, molekulách nebo pevných látkách) vyžadují elektronové pulzy o délce kratší než 1 fs. Samotná vizualizace potom probíhá pomocí ultrarychlé elektronové difrakce a mikroskopie.

Prezentovaný koncept generování attosekundových elektronových pulzů je založen na periodické modulaci energie elektronového svazku skrze interakci s ponderomotorickým potenciálem optické vlny, která je vytvářena ve vakuu dvěma femtosekundovými laserovými pulzy na různých frekvencích. Následné disperzní šíření ve vakuu vede v důsledku modulace rychlosti elektronů nepružným rozptylem na jejich kompresi a formování ultrakrátkého pulzu. Tato technika je použitelná pro přizpůsobení a počáteční charakterizaci pulzů volných elektronů v experimentech se subfemtosekundovým časovým rozlišením.

Kromě ponderomotorického potenciálu může elektron také neelasticky interagovat s optickými blízkými poli nanostruktur, viz např. práce (De Abajo, 2010).



Obrázek 1.1: Schéma interakce elektronového pulzu s optickým blízkým polem uhlíkové nanotrubicе převzaté z (Barwick a kol., 2009). **a)** Situace před interakcí, kdy se svazek elektronů a laserový pulz ještě nepřekrývají. **b)** Přesný moment maximálního překryvu laserového pulzu, vzniklé evanescentní vlny a elektronového svazku. **c)** Ilustrace procesu bezprostředně po interakci, kdy elektron získá nebo ztratí energii o velikosti celočíselného násobku energie fotonu.

Tento princip je založen na faktu, že fázová rychlost šíření vzniklé evanescentní optické vlny může být menší než rychlost světla. Pokud je fázová rychlost synchronizována s rychlostí šíření elektronu, bude změna hybnosti elektronu záviset na fázi pole, kterou po dobu interakce cítí, a také na typu prostorového modu světla, se kterým interaguje. Tato interakce slouží například k zobrazování optických blízkých polí nanostruktur, čímž se zabývá např. práce (Barwick a kol., 2009), z níž byl převzat obrázek 1.1.

Obecně lze říci, že neelastický rozptyl elektronů na optických polích je většinou popisován v aproximaci zanedbatelné změny rychlosti elektronů během interakce. Uvažuje se tedy, že na elektron působí síla, která závisí pouze na počáteční fázi pole (ponderomotorického potenciálu) a velikosti obálky optického pole, ale nemění se v důsledku změny polohy elektronu v klidové soustavě vlny. Tato aproximace je velmi dobře platná pro elektrony urychlené na kinetické energie desítek keV, jejichž energie se změní během interakce s femtosekundovým laserovým pulzem pouze o několik eV. Existují ovšem aplikace (např. urychlování elektronů pomocí optických polí (Breuer a Hommelhoff, 2013)), které jdou za hranice aplikovatelnosti této aproximace. V této práci se budeme zabývat analytickým řešením dynamiky elektronů v potenciálu, jehož tvar je daný harmonickou funkcí prostorové souřadnice podél směru šíření elektronů, a to za hranicí výše zmíněné aproximace. V klasickém přístupu tedy budeme řešit pohybové rovnice pro elektron v potenciálu daného tvaru. V kvantovém modelu se nejprve podíváme na dynamiku elektronu v rámci jedné periody potenciálu a následně se budeme zabývat případem plného harmonického potenciálu pro elektron s ostrou hodnotou hybnosti.

1.3 Uvažované 1D zjednodušení

Jak již bylo zmíněno, tak rozptyl elektronového svazku na „intenzitní mřížce“ spojené se stojatou vlnou byl teoreticky studován už Kapitza a Diracem (Kapitza a Dirac, 1933) v počátcích vývoje kvantové mechaniky a byl demonstrován také experimentálně. V původní verzi experimentu ale docházelo pouze ke změně transversální složky hybnosti a podélná hybnost zůstávala nezměněna. My se ale v návaznosti na práci (Kozák a kol., 2018a) zaměříme na interakci, ve které dochází pouze ke změně podélné hybnosti. Zároveň ale povolíme asynchronní režim, ve kterém není na počátku rychlost záznějové vlny (generované protichůdnými laserovými pulzy) totožná s rychlostí volně se šířících elektronů (viz obrázek 1.2).

Interakce elektronů s periodickým ponderomotorickým potenciálem vede za uvažované geometrie, jak uvidíme, na periodické fokusování a rozostřování distribuce elektronů, a to jak v reálném prostoru, tak v prostoru hybností (energií). Ukážeme, že pro správně zvolenou sílu potenciálu umožňuje zmíněný asynchronní režim interakce generování ostrého píku v energetickém spektru, který bude posunutý oproti původní energii elektronů. Tím lze elektrony selektivně zpomalit (případ, kdy je záznějová vlna pomalejší než elektron) nebo urychlit (případ, kdy je vlna rychlejší), což by v synchronním případě nebylo možné.

V popisu se zaměříme na experimentální situaci znázorněnou na obrázku 1.2, pro níž později odvodíme tvar ponderomotorického potenciálu. V této situaci se laserové pulzy šíří proti sobě a elektron se s nimi pohybuje kolineárně. Zmíníme ale, že článek (Kozák a kol., 2018a) obsahuje mimojiné teoretické odvození způ-

sobu, jakým získat stojatou vlnu v klidové soustavě libovolně rychlého elektronu a zároveň při interakci zachovat transversální hybnost pro speciální úhly α a β mezi směrem šíření elektronu a směry propagace dvou střetávajících se vln.

Odvození stojí na relativistických zákonech zachování energie a hybnosti pro případ nulové změny transversální hybnosti, tedy $\Delta \hbar \mathbf{k}_\perp = 0$, kde \mathbf{k}_\perp je transversální část vlnového vektoru elektronového svazku a \hbar je redukovaná Planckova konstanta. Z pohledu zákonů zachování rozptýlená částice současně absorbuje foton z jedné vlny a emituje foton do vlny druhé skrze stimulovaný Comptonův rozptyl. Síla interakce je pak úměrná intenzitě vln (tedy četnosti fotonů). Důležitým důsledkem odvození je, že pokud směry šíření vln leží v jedné rovině se směrem propagace elektronového svazku, tak lze v souladu se zákony zachování vždy zvolit experimentální parametry (frekvence vln ω_1 , ω_2 a úhly α , β mezi šířícími se vlnami a elektronovým svazkem) tak, aby docházelo pouze ke změně podélné hybnosti elektronů. V takovém případě bude ponderomotorický potenciál, který elektrony pocítují, záviset pouze na jedné prostorové souřadnici a 1D modelová situace, která je znázorněná na obrázku 1.2, bude oprávněná.

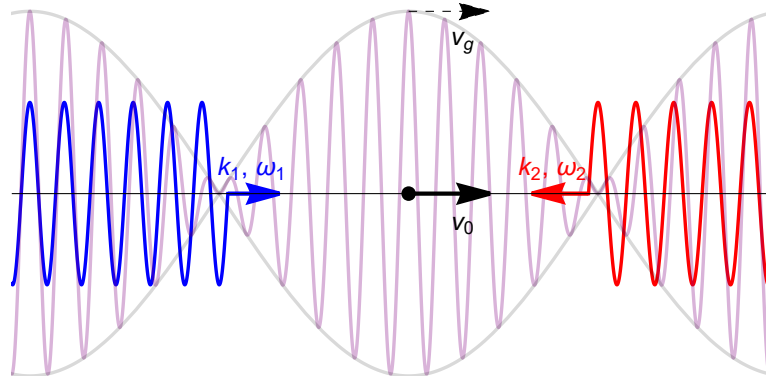
1.4 Nerelativistická ponderomotorická síla monofrekvenčního oscilujícího pole

Uvažme nabitou částici v poli elektromagnetické vlny. Klasická interakce pole s částicí je vyjádřena přes působení Lorentzovy síly

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}, t) = q [\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{v} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)] ,$$

kde q je náboj částice, \mathbf{r} její polohový vektor, \mathbf{v} rychlost a \mathbf{E} , \mathbf{B} značí vektory elektrické intenzity a magnetické indukce pole.

Za dále specifikované situace má zásadní vliv na výslednou trajektorii částice právě ponderomotorická síla. Její působení pocítuje částice v rychle oscilujícím nehomogenním elektromagnetickém poli. Jedná se o nelineární sílu (v intenzitě pole), která způsobuje, že se částice pohybuje směrem do oblasti o nižší velikosti intenzity narozdíl od pouhých oscilací kolem pevného bodu (oscilačního centra), jako je tomu v případě homogenního oscilujícího pole. Děje se tak, jelikož částice



Obrázek 1.2: Elektron s rychlostí \mathbf{v}_0 v poli záznějové vlny (fialová) s grupovou rychlostí \mathbf{v}_g , vzniklé superpozicí vln o frekvencích ω_1 (modrá) a ω_2 (červená).

v jedné polovině oscilační periody vnímá menší velikost síly než ve druhé a časově středované působení tak částici vytlačuje z oblastí o vysoké intenzitě.

Vzhledem k souvislosti ponderomotorické síly s oscilujícími nehomogenními poli není překvapivé, že jde o působení zkoumané v oblasti laserové fyziky. Odvození ponderomotorické síly a jí příslušejícího potenciálu tak najdeme v mnoha textech věnovaných interakci laserových pulzů s nabitými částicemi. Příkladem může být úvodní kapitola poznámek D. Bauera k přednášce o interakci laserového záření s hmotou (Bauer, 2006) nebo článek E. J. Bochovea, ve kterém odvozuje klasické radiační síly v obecnějším případě obsahujícím tlumení pole (Bochove, 1996). Pro naše účely nejprve v krátkosti shrneme Bauerovo odvození, které předpokládá, že je částice na počátku v klidu. Hlavní kroky postupu potom aplikujeme na superpozici dvou elektromagnetických vln pro částici, která má na počátku nenulovou rychlost \mathbf{v}_0 , pro níž ale platí $|\mathbf{v}_0| \ll c$.

Uvažme elektromagnetické pole, např. laserového pulzu, ve tvaru

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \left(\tilde{\mathbf{E}}_0(\mathbf{r}, t) e^{i\omega t} + \tilde{\mathbf{E}}_0^*(\mathbf{r}, t) e^{-i\omega t} \right), \quad (1.1)$$

kde $\tilde{\mathbf{E}}_0$ je komplexní amplituda pole a ω je oscilační frekvence. Odvození ponderomotorické síly působící na částici o náboji q a hmotnosti m stojí na možnosti separace relevantních časových škál na krátké, které jsou dané oscilační periodou pulzu $2\pi/\omega$ a dlouhé, které souvisí s pohybem částice v důsledku ponderomotorické síly, tedy s působením středovaným přes mnoho period. Předpokládáme proto, že časová modulace amplitudy $\tilde{\mathbf{E}}_0$ je v porovnání s oscilacemi pomalá, což nám umožní s velkou přesností uvažovat

$$\frac{\partial \mathbf{B}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \implies \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) \approx \frac{i}{2\omega} \nabla \times \left(\tilde{\mathbf{E}}_0(\mathbf{r}, t) e^{i\omega t} - \tilde{\mathbf{E}}_0^*(\mathbf{r}, t) e^{-i\omega t} \right).$$

Za těchto předpokladů rozvineme trajektorii $\mathbf{r}(t)$ do členů odpovídajících efektům, které jsou lineární resp. kvadratické v polích a zároveň vhodně rozvineme Lorentzovu sílu na pravé straně pohybové rovnice. Poté srovnáme členy daných stupňů a v sestavených rovnicích identifikujeme člen, který po časovém středování vede na výraz pro ponderomotorickou sílu (provedeno v části 1.5).

Výsledkem popsaného postupu jsou, pro pole dané vztahem (1.1), výrazy (viz Bauer, 2006) pro ponderomotorickou sílu $\mathbf{F}_p(\mathbf{r}, t)$ a s ní spojený potenciál $U_p(\mathbf{r}, t)$ ve tvaru

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_p(\mathbf{r}, t) &= -\frac{q^2}{4m\omega^2} \nabla \left| \tilde{\mathbf{E}}_0(\mathbf{r}, t) \right|^2, \\ U_p(\mathbf{r}, t) &= \frac{q^2}{4m\omega^2} \left| \tilde{\mathbf{E}}_0(\mathbf{r}, t) \right|^2. \end{aligned} \quad (1.2)$$

1.5 Odvození pro případ superpozice jednoduchých polí

Vzhledem k tomu, že bude naším ústředním zájmem zkoumání chování nabitě částice v ponderomotorickém potenciálu záznějové vlny, která vzniká superpozicí dvou stejně intenzivních vln o rozdílných frekvencích, tak je třeba odvození potenciálu na tuto situaci zobecnit.

Uvažme proto kompozitní elektromagnetické pole

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t), \quad \text{kde} \\ \mathbf{E}_i(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{2} \left(\boldsymbol{\xi}_i(\mathbf{r}, t) e^{i\omega_i t} + \boldsymbol{\xi}_i^*(\mathbf{r}, t) e^{-i\omega_i t} \right) \quad \text{pro } i \in \{1, 2\}.\end{aligned}\tag{1.3}$$

Vektory $\boldsymbol{\xi}_i$ představují komplexní amplitudy vln a ω_i příslušné frekvence. Nechť se částice v čase $t = 0$ nachází v místě \mathbf{r}_0 a její počáteční rychlost je \mathbf{v}_0 . Pohybovou rovnici chceme řešit v klidové soustavě částice $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{v}_0 t$, a proto bychom měli provést Lorentzovu transformaci pole

$$\begin{aligned}\mathbf{E}'_{\parallel} &= \mathbf{E}_{\parallel}, \\ \mathbf{E}'_{\perp} &= \gamma (\mathbf{E}_{\perp} + \mathbf{v}_0 \times \mathbf{B}), \\ \mathbf{B}'_{\parallel} &= \mathbf{B}_{\parallel}, \\ \mathbf{B}'_{\perp} &= \gamma \left(\mathbf{B}_{\perp} - \frac{1}{c^2} \mathbf{v}_0 \times \mathbf{E} \right),\end{aligned}$$

kde indexy \parallel, \perp značí složku rovnoběžnou resp. kolmou vůči směru rychlosti \mathbf{v}_0 . Jelikož budeme ale uvažovat nerelativistickou rychlost $|\mathbf{v}_0| \ll c$, tak aproximujeme $\gamma \approx 1$. Uvažovaná transformace tak bude mít tvar

$$\begin{aligned}\mathbf{E}' &= \mathbf{E} + \mathbf{v}_0 \times \mathbf{B}, \\ \mathbf{B}' &= \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \mathbf{v}_0 \times \mathbf{E}.\end{aligned}\tag{1.4}$$

V klidové soustavě napíšeme pohybovou rovnici pro nabitou částici, na níž působí Lorentzova síla

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}'(t)}{dt^2} = q \left[\mathbf{E}'(\mathbf{r}', t) + \frac{d\mathbf{r}'(t)}{dt} \times \mathbf{B}'(\mathbf{r}', t) \right].$$

Abychom rovnici zjednodušili, tak provedeme analogicky k článku (Bochove, 1996) rozvoje

$$\begin{aligned}\mathbf{r}'(t) - \mathbf{r}'_0 &= \mathbf{R}^{(1)}(t) + \mathbf{R}^{(2)}(t) + \dots, \\ \mathbf{E}'(\mathbf{r}', t) &= \mathbf{E}'(\mathbf{r}'_0, t) + (\mathbf{r}'(t) - \mathbf{r}'_0) \cdot \nabla \mathbf{E}'(\mathbf{r}'_0, t) + \dots, \\ \mathbf{B}'(\mathbf{r}', t) &= \mathbf{B}'(\mathbf{r}'_0, t) + (\mathbf{r}'(t) - \mathbf{r}'_0) \cdot \nabla \mathbf{B}'(\mathbf{r}'_0, t) + \dots,\end{aligned}\tag{1.5}$$

kde členy $\mathbf{R}^{(i)}(t)$ rozvoje trajektorie v počáteční klidové soustavě částice odpovídají působení úměrnému i -té mocnině polí a vektory pole jsou rozvinuty v mocnínách posunutí částice od původní polohy¹. Pokud dosadíme rozvoje do pohybové rovnice a srovnáme členy, které závisí na \mathbf{E}' a \mathbf{B}' lineárně, resp. kvadraticky, tak získáme soustavu rovnic ve tvaru

$$m \frac{d^2 \mathbf{R}^{(1)}(t)}{dt^2} = q \mathbf{E}'(\mathbf{r}'_0, t),\tag{1.6a}$$

$$m \frac{d^2 \mathbf{R}^{(2)}(t)}{dt^2} = q \left[\mathbf{R}^{(1)}(t) \cdot \nabla \mathbf{E}'(\mathbf{r}'_0, t) + \frac{d\mathbf{R}^{(1)}(t)}{dt} \times \mathbf{B}'(\mathbf{r}'_0, t) \right],\tag{1.6b}$$

¹Používáme značení \mathbf{r}'_0 i přes to, že počáteční poloha je v klidové i laboratorní soustavě pro $t = 0$ stejná. Důvodem je, že vektor \mathbf{r}'_0 bude obecně odkazovat na počáteční polohu v klidové soustavě, a ta se v nenulovém čase od počáteční polohy v laboratorní soustavě již lišit bude.

kde lze jednoduše nahlédnout z předchozího, že oba členy rozvoje trajektorie splňují počáteční podmínky $\mathbf{R}^{(i)}(t=0) = 0$ a $\frac{d}{dt}\mathbf{R}^{(i)}(t=0) = 0$.

Soustava (1.6) bude pro obecná pole obtížně analyticky řešitelná. Omezme se proto na jednoduchou podobu polí a diskutovanou 1D geometrii problému. Uvažme dvě rovinné vlny s vlnovými vektory \mathbf{k}_1 a \mathbf{k}_2 , které se šíří proti sobě. Budeme předpokládat, že mají obě vlny stejnou velikost amplitudy, jsou polarizované kolmo na směr šíření, ale polarizace jsou si vzájemně rovnoběžné, a že počáteční rychlost nabitě částice \mathbf{v}_0 je rovnoběžná se směrem šíření vln. Efektivně tedy uvažujeme problém se dvěma význačnými směry, a tak mějme takovou soustavu souřadnic, kdy jsou počáteční rychlost a směr šíření vln rovnoběžné s osou x a vlny jsou polarizované ve směru osy y .

Amplitudy ξ_i (viz (1.3)) budou za výše popsané situace v podobě

$$\begin{aligned}\xi_1(x) &= E_0 e^{i(-k_1 x + \varphi_1)} \mathbf{e}_y, \\ \xi_2(x) &= E_0 e^{i(k_2 x + \varphi_2)} \mathbf{e}_y,\end{aligned}$$

kde \mathbf{e}_y značí jednotkový vektor ve směru osy y , φ_i jsou počáteční fáze vln a E_0 je konstantní velikost amplitudy. Místo předpokládané „pomalé“ časové závislosti amplitud (diskutované v předchozí části) jsme tak zvolili amplitudy zcela časově nezávislé. Po dopočítání magnetické indukce z Maxwellovy rovnice (stejně tak jako v případě jedné vlny) dostaneme kompozitní pole ve tvaru

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(x, t) &= E_0 [\cos(\omega_1 t - k_1 x + \varphi_1) + \cos(\omega_2 t + k_2 x + \varphi_2)] \mathbf{e}_y, \\ \mathbf{B}(x, t) &= \frac{E_0}{c} [\cos(\omega_1 t - k_1 x + \varphi_1) - \cos(\omega_2 t + k_2 x + \varphi_2)] \mathbf{e}_z.\end{aligned}\tag{1.7}$$

Uvažujeme rychlost částice $\mathbf{v}_0 = v_0 \mathbf{e}_x$ a počáteční polohu (její souřadnice v laboratorní soustavě) $\mathbf{r}_0 = x_0 \mathbf{e}_x$. Po transformaci (1.4) a dosazení velikosti vlnového vektoru ve vakuu $k_i = \omega_i/c$ tak dostaneme v klidové soustavě pole

$$\begin{aligned}\mathbf{E}'(x', t) &= E_0 \left[\left(1 - \frac{v_0}{c}\right) \cos\left(\omega_1 t \left(1 - \frac{v_0}{c}\right) - \frac{\omega_1 x'}{c} + \varphi_1\right) \right. \\ &\quad \left. + \left(1 + \frac{v_0}{c}\right) \cos\left(\omega_2 t \left(1 + \frac{v_0}{c}\right) + \frac{\omega_2 x'}{c} + \varphi_2\right) \right] \mathbf{e}_y, \\ \mathbf{B}'(x', t) &= \frac{E_0}{c} \left[\left(1 - \frac{v_0}{c}\right) \cos\left(\omega_1 t \left(1 - \frac{v_0}{c}\right) - \frac{\omega_1 x'}{c} + \varphi_1\right) \right. \\ &\quad \left. - \left(1 + \frac{v_0}{c}\right) \cos\left(\omega_2 t \left(1 + \frac{v_0}{c}\right) + \frac{\omega_2 x'}{c} + \varphi_2\right) \right] \mathbf{e}_z.\end{aligned}\tag{1.8}$$

Pro elektromagnetické pole dané vztahem (1.8) chceme získat řešení rovnice (1.6a) a dosadit jej do pravé strany rovnice (1.6b). Časová střední hodnota výsledného výrazu bude totiž představovat hledané vyjádření ponderomotorické síly

působící na částici. Řešení rovnice (1.6a) vede přímou integrací na

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{R}^{(1)}(t)}{dt} &= \frac{qE_0}{m} \left[\frac{1}{\omega_1} \sin \left(\omega_1 t \left(1 - \frac{v_0}{c} \right) - \frac{\omega_1 x'_0}{c} + \varphi_1 \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\omega_2} \sin \left(\omega_2 t \left(1 + \frac{v_0}{c} \right) + \frac{\omega_2 x'_0}{c} + \varphi_2 \right) \right] \mathbf{e}_y, \\ \mathbf{R}^{(1)}(t) &= -\frac{qE_0}{m} \left[\frac{1}{\omega_1^2 \left(1 - \frac{v_0}{c} \right)} \cos \left(\omega_1 t \left(1 - \frac{v_0}{c} \right) - \frac{\omega_1 x'_0}{c} + \varphi_1 \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\omega_2^2 \left(1 + \frac{v_0}{c} \right)} \cos \left(\omega_2 t \left(1 + \frac{v_0}{c} \right) + \frac{\omega_2 x'_0}{c} + \varphi_2 \right) \right] \mathbf{e}_y.\end{aligned}$$

Vidíme, že první člen rozvoje trajektorie představuje pouze oscilace ve směru polarizace elektrické intenzity pole (v našem případě osy y). Před dosazením výsledků do pravé strany (1.6b) si uvědomíme, že platí

$$\mathbf{R}^{(1)}(t) \equiv R^{(1)}(t) \mathbf{e}_y \implies \mathbf{R}^{(1)}(t) \cdot \nabla \mathbf{E}'(\mathbf{r}'_0, t) = R^{(1)}(t) \frac{\partial \mathbf{E}'}{\partial y'}(\mathbf{r}'_0, t) = 0,$$

kde poslední rovnost plyne z faktu, že elektrická intenzita \mathbf{E}' závisí pouze na souřadnici x' . Působící síla druhého řádu (značme $\mathbf{F}^{(2)}$) se tak v tomto případě zredukuje na

$$\mathbf{F}^{(2)}(\mathbf{r}'_0, t) = q \frac{d\mathbf{R}^{(1)}(t)}{dt} \times \mathbf{B}'(\mathbf{r}'_0, t).$$

Dosazení vede po úpravách na výraz

$$\begin{aligned}\mathbf{F}^{(2)}(\mathbf{r}'_0, t) &= \frac{q^2 E_0^2 \mathbf{e}_x}{mc} \left[\frac{1 - \frac{v_0}{c}}{2\omega_1} \sin \left(2\omega_1 t \left(1 - \frac{v_0}{c} \right) - 2\frac{\omega_1 x'_0}{c} + 2\varphi_1 \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1 + \frac{v_0}{c}}{2\omega_2} \sin \left(2\omega_2 t \left(1 + \frac{v_0}{c} \right) + 2\frac{\omega_2 x'_0}{c} + 2\varphi_2 \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1 - \frac{v_0}{c}}{\omega_2} \sin \left(\omega_2 t \left(1 + \frac{v_0}{c} \right) + \frac{\omega_2 x'_0}{c} + \varphi_2 \right) \cos \left(\omega_1 t \left(1 - \frac{v_0}{c} \right) - \frac{\omega_1 x'_0}{c} + \varphi_1 \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1 + \frac{v_0}{c}}{\omega_1} \sin \left(\omega_1 t \left(1 - \frac{v_0}{c} \right) - \frac{\omega_1 x'_0}{c} + \varphi_1 \right) \cos \left(\omega_2 t \left(1 + \frac{v_0}{c} \right) + \frac{\omega_2 x'_0}{c} + \varphi_2 \right) \right].\end{aligned}$$

Tento tvar bychom chtěli časově vystředovat a dojít ke kompaktnímu výrazu analogickému (1.2). Vidíme ale, že to obecně možné není. Důvodem k časovému středování (viz část 1.4) je eliminace časové závislosti skrze oscilační frekvence ω_i . Pokud ale v předchozím výrazu provedeme časové středování přes nějaký velký (v porovnání s oscilacemi) časový interval, tak se první dva členy, které oscilují na jedné frekvenci, vždy vystředují na nulu. Netriviální výsledek tak musí dávat druhá dvojice členů obsahující dvě různé frekvence. Pro libovolné v_0 ale středování na netriviální výsledek evidentně nevede.

Všimneme si ale, že pro speciální² (dále synchronní) rychlost v_0 , splňující

$$\omega_1 \left(1 - \frac{v_0}{c}\right) = \omega_2 \left(1 + \frac{v_0}{c}\right) \implies v_0 = c \frac{\omega_1 - \omega_2}{\omega_1 + \omega_2},$$

bude i druhá dvojice členů oscilovat na jedné frekvenci a zároveň je bude možné díky stejným prefaktorům pomocí součtového vzorce pro $\sin(x - y)$ sloučit do jednoho časově nezávislého členu. Dosazením synchronní rychlosti tak výraz pro $\mathbf{F}^{(2)}$ dostaneme před středováním do tvaru

$$\begin{aligned} \mathbf{F}^{(2)}(\mathbf{r}'_0, t) = & \frac{q^2 E_0^2}{mc(\omega_1 + \omega_2)} \left[\frac{\omega_2}{\omega_1} \sin \left(\frac{4\omega_1\omega_2 t}{\omega_1 + \omega_2} - 2\frac{\omega_1 x'_0}{c} + 2\varphi_1 \right) \right. \\ & \left. - \frac{\omega_1}{\omega_2} \sin \left(\frac{4\omega_1\omega_2 t}{\omega_1 + \omega_2} + 2\frac{\omega_2 x'_0}{c} + 2\varphi_2 \right) + 2 \sin \left(\frac{x'_0(\omega_1 + \omega_2)}{c} + \varphi_2 - \varphi_1 \right) \right] \mathbf{e}_x. \end{aligned}$$

Pokud provedeme časové středování

$$\langle \mathbf{F}^{(2)} \rangle(\mathbf{r}'_0) = \frac{1}{T} \int_0^T \mathbf{F}^{(2)}(\mathbf{r}'_0, t) dt,$$

kde pro délku intervalu T platí $T \gg \pi(\omega_1 + \omega_2)/(2\omega_1\omega_2)$, tak vyjádříme hledanou ponderomotorickou sílu, která působí na částici v místě $\mathbf{r}'_0 = x'_0 \mathbf{e}_x$, ve tvaru

$$\mathbf{F}_p(x'_0) = \frac{2q^2 E_0^2}{mc(\omega_1 + \omega_2)} \sin \left(\frac{x'_0(\omega_1 + \omega_2)}{c} + \varphi_2 - \varphi_1 \right) \mathbf{e}_x. \quad (1.9)$$

Vidíme tedy, že na částici bude skutečně působit síla, která je způsobená prostoro-rovou modulací intenzity a působit bude kolmo na směr polarizace vln. Z (1.9) je zároveň zřejmé, že je síla invariantní vůči záměně $q \leftrightarrow -q$, a tedy působí stejně na kladně i záporně nabitě částice. Integrací jednoduše určíme (až na aditivní konstantu) příslušný ponderomotorický potenciál

$$U_p(x'_0) = \frac{2q^2 E_0^2}{m(\omega_1 + \omega_2)^2} \cos \left(\frac{x'_0(\omega_1 + \omega_2)}{c} + \varphi_2 - \varphi_1 \right) + konst.$$

Jelikož jsme počáteční polohu v klidové soustavě x'_0 během odvození nijak blíže nespécifikovali, tak můžeme odvozené vyjádření chápat jako funkci obecné souřadnice $x' \equiv x'_0$ v klidové soustavě částice. Po zpětné transformaci do laboratorní soustavy tak dostaneme (dosazením synchronní rychlosti částice) ponderomotorický potenciál

$$U_p(x, t) = \frac{2q^2 E_0^2}{m(\omega_1 + \omega_2)^2} \cos \left(\frac{x(\omega_1 + \omega_2)}{c} - (\omega_1 - \omega_2)t + \varphi_2 - \varphi_1 \right) + konst. \quad (1.10)$$

Konkrétní volbu integrační konstanty a diskuzi ohledně významu konstantního fázového posunu $\varphi_2 - \varphi_1$ provedeme před řešením pohybové rovnice.

²Tato rychlost má jednoduchou interpretaci z hlediska uvažovaného elektromagnetického pole. Jedná se o grupovou rychlost složené vlny, o čemž se jednoduše můžeme přesvědčit, když na (1.7) použijeme goniometrickou identitu $\cos x + \cos y = 2 \cos((x + y)/2) \cos((x - y)/2)$. V dalších částech tak občas zaměníme pojmy synchronní rychlost částice a grupová rychlost pole, ale vždy budeme myslet totéž.

1.6 Klasický versus kvantový přístup

V dalších kapitolách budeme chtít teoreticky popsat a následně simulovat situaci analogickou Kapitovou-Diracovu efektu, ale se záměnou rolí transverzální a podélné souřadnice. Elektronů se budou šířit kolineárně se střetávajícími se laserovými pulzy a stojatá vlna se bude vytvářet v jejich klidové soustavě. Interakce se záznějovou vlnou bude v našem zjednodušení, jak již bylo zmíněno, vyjádřena skrze čistě klasický tvar ponderomotorického potenciálu (1.10). Bude se jednat o nepružnou interakci, což je v plně kvantovém popisu způsobeno rozdílnými frekvencemi koincidujících laserových pulzů, tedy rozdílnými energiemi absorbovaného a emitovaného fotonu ve stimulovaném Comptonově rozptylu.

Vzhledem k periodicitě potenciálu v podélném směru šíření souboru elektronů bychom očekávali v kvantovém modelu koherentní rozptyl vedoucí na interferenční peaky v energetickém spektru. Taková podoba spektra by byla důsledkem kvantové interference mezi elektronovými vlnami rozptýlenými od po sobě jdoucích period potenciálu, stejně jako tomu bylo ve spektru transverzálních hybností z výše popsaného původního Kapitova-Diracova efektu. Jak je ale patrné např. z (Kozák a kol., 2018a), tak k dosažení koherentního režimu interakce je třeba, aby podélná (koherentní) délka počátečního elektronového pulzu byla mnohonásobně větší než perioda rozptylového potenciálu, tedy v našem případě než perioda záznějové vlny. V opačném případě, ve kterém je podélná koherentní délka elektronového pulzu menší nebo srovnatelná s prostorovou periodou ponderomotorického potenciálu, bude mít kvantová interference zanedbatelný vliv a na interakci lze nahlížet jako na klasický rozptyl bodové částice, který je popsán trajektorií řešící pohybovou rovnicí.

2. Klasický model

V této kapitole se budeme zabývat klasickým náhledem na situaci, tedy modelem, ve kterém je interakce elektronu s ponderomotorickým potenciálem vyjádřena jako rozptyl nerelativistické nabitě bodové částice. Pro popsanou geometrickou situaci jsme odvodili tvar potenciálu (1.10). V tomto obecném vyjádření jsme si ponechali volnost ve volbě integrační konstanty. Konstantní fázový posun $\varphi_2 - \varphi_1$ je možné odtransformovat pouhým posunem souřadnicové soustavy, tedy rovněž postrádá přímý fyzikální význam.

2.1 Analytické řešení pohybové rovnice

Mějme elektron v poli ponderomotorického potenciálu ve tvaru

$$U_p(z, t) = \frac{A}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi(v_g t - z)}{\lambda} \right), \quad (2.1)$$

kde A je konstantní amplituda, v_g je grupová (synchronní) rychlost potenciálu a λ je jeho prostorová perioda. Pohybovou rovnicí

$$m\ddot{z}(t) = -\frac{\partial U}{\partial z}(z, t) \implies \ddot{z} = \frac{\pi A}{m\lambda} \sin \frac{2\pi(v_g t - z(t))}{\lambda}$$

budeme řešit v klidové soustavě potenciálu, tedy přejdeme k souřadnici $q = z - v_g t$. V této soustavě se pohybová rovnice dostává na tvar

$$\ddot{q}(t) + \frac{\pi A}{m\lambda} \sin \frac{2\pi q(t)}{\lambda} = 0. \quad (2.2)$$

V rovnici (2.2) poznáváme analogii pohybové rovnice matematického kyvadla, kterou si v této části vyřešíme v její nelineární podobě pro obecné počáteční podmínky

$$q(t=0) = z(t=0) \equiv z_0, \quad \dot{q}(t=0) = \dot{z}(t=0) - v_g \equiv \delta v_0, \quad (2.3)$$

u kterých budeme pouze formálně předpokládat, že $|\delta v_0| \ll |v_g|$, tak aby i pro částici pohybující se vzhledem k záznějové vlně byl efektivní potenciál (2.1), který částice pocítuje, stejný. Řešení nelineárního kyvadla se věnuje mnoho prací, příkladem může být článek Beléndeze a kol. (Beléndez a kol., 2007), který se omezuje na nulovou počáteční rychlost kyvadla. V našem zájmu je ale řešit rovnici za obecných podmínek (2.3), tím zahrneme právě i režim, ve kterém rychlost elektronu není synchronizovaná s grupovou rychlostí potenciálu. Motivací k řešení rovnice v jejím obecném tvaru je zejména možnost vyhnout se numerické integraci pohybové rovnice a případné rozpoznání některých význačných vlastností řešení.

První integrál rovnice (2.2) jednoduše spočteme, vynásobíme-li obě strany $\dot{q}(t)$. To umožní integraci v čase, která vede na

$$(\dot{q}(t))^2 = \frac{A}{m} \cos \frac{2\pi q(t)}{\lambda} + c_1,$$

kde vyčíslením v $t = 0$ a dosazením počátečních podmínek (2.3) identifikujeme integrační konstantu

$$c_1 = \delta v_0^2 - \frac{A}{m} \cos \frac{2\pi z_0}{\lambda}.$$

Po první integraci rovnice (2.2) tak máme určený kvadrát rychlosti elektronu v klidové soustavě potenciálu

$$(\dot{q}(t))^2 = \delta v_0^2 + \frac{A}{m} \left(\cos \frac{2\pi q(t)}{\lambda} - \cos \frac{2\pi z_0}{\lambda} \right). \quad (2.4)$$

Vztah (2.4) převedeme pomocí identity $1 - \cos(2x) = 2 \sin^2 x$ a vytknutí výrazu v 1. závorce do tvaru

$$\begin{aligned} (\dot{q}(t))^2 &= \delta v_0^2 \left(1 + \frac{2A}{m\delta v_0^2} \sin^2 \frac{\pi z_0}{\lambda} \right) \left(1 - \frac{\frac{2A}{m\delta v_0^2}}{1 + \frac{2A}{m\delta v_0^2} \sin^2 \frac{\pi z_0}{\lambda}} \sin^2 \frac{\pi q(t)}{\lambda} \right) \\ &= \frac{2A}{m} \frac{1}{\kappa^2} \left(1 - \kappa^2 \sin^2 \frac{\pi q(t)}{\lambda} \right), \end{aligned}$$

kde jsme zavedli parametr $\kappa^2 \equiv \left(\frac{2A}{m\delta v_0^2} \right) / \left(1 + \frac{2A}{m\delta v_0^2} \sin^2 \frac{\pi z_0}{\lambda} \right)$. Hodnota kladného reálného parametru κ , který je plně určený počátečními podmínkami z_0 , δv_0 a parametry potenciálu A , λ , rozhoduje jednoduchým způsobem, zda bude daný elektron vázaný v rámci jedné prostorové periody potenciálu, nebo bude mít dostatečnou energii na přebíhání mezi periodami.

Tuto skutečnost náhledneme jednoduchou úvahou. Mějme elektron s počáteční polohou z_0 a počáteční rychlostí v klidové soustavě potenciálu δv_0 . Kinetická energie, vyjádřena v klidové soustavě vlny, která je potřebná k opuštění dané prostorové periody potenciálu, je dána relací

$$\frac{1}{2} m \delta v_0^2 > U_p^{max} - U_p(q = z_0).$$

Maximum potenciálu U_p^{max} je dáno velikostí amplitudy A . Po dosazení $U_p(q = z_0)$ tak dostaneme podmínku

$$\frac{1}{2} m \delta v_0^2 > A - A \sin^2 \frac{\pi z_0}{\lambda} \iff 1 > \kappa^2.$$

Vidíme tedy, že elektron s $\kappa < 1$ bude cestovat mezi periodami a elektron s $\kappa > 1$ bude uvězněn v jedné prostorové periodě potenciálu. Tento poznatek se nám bude hodit v další práci s rovnicí

$$|\dot{q}(t)| = \sqrt{\frac{2A}{m\kappa^2}} \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \frac{\pi q(t)}{\lambda}}. \quad (2.5)$$

Případ nevázaných elektronů (tj. $\kappa < 1$) je jednodušší, a proto s ním začneme. Jednodušší je zejména proto, protože víme, že rychlost elektronu nebude podél trajektorie měnit znaménko, protože nevázaný elektron nemá v potenciálu body obratu. Znaménko rychlosti je tak určeno znaménkem počáteční rychlosti δv_0 , což je ostatně zřejmé už ze vztahu (2.4) v čase $t = 0$. Pro nevázané elektrony tak z (2.5) dostaneme

$$\dot{q}(t) = \text{sgn}(\delta v_0) \sqrt{\frac{2A}{m\kappa^2}} \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \frac{\pi q(t)}{\lambda}},$$

odkud separací proměnných a substitucí v integrálu získáme

$$\int_0^{Q(t)} \frac{d\xi}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \xi}} = \operatorname{sgn}(\delta v_0) \frac{\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{2A}{m\kappa^2}} t + c_2, \quad (2.6)$$

kde pro kompaktnost zápisu značíme $Q(t) \equiv \frac{\pi q(t)}{\lambda}$. Rovnici (2.6) chceme invertovat, abychom měli funkční předpis pro trajektorii $q(t)$. Na levé straně rovnice poznáváme neúplný eliptický integrál prvního druhu $F(Q(t), \kappa^2)$. Konstantu c_2 jednoduše najdeme z počáteční podmínky, jelikož dosazení $t = 0$ do (2.6) vede na

$$c_2 = F\left(\frac{\pi z_0}{\lambda}, \kappa^2\right).$$

K inverzi eliptických integrálů se váže celá třída speciálních funkcí, které jsou v literatuře nejčastěji nazývány *Jacobian elliptic functions*. Uceleně sepsané vlastnosti eliptických integrálů a jejich inverzí najdeme např. v příručce matematických funkcí vydané Olverem a kol. (Olver a kol., 2010). Jednou z těchto funkcí je Jacobiho amplituda $am(x, k)$, jejíž definiční vztah lze formulovat jako

$$x = F(\phi, k) \implies \phi = am(x, k). \quad (2.7)$$

Na základě vztahu (2.6) tak lze popsat trajektorii nevázaných elektronů ($\kappa < 1$) v klidové soustavě potenciálu (2.1) jako

$$q(t) = \frac{\lambda}{\pi} am\left(\operatorname{sgn}(\delta v_0) \frac{\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{2A}{m\kappa^2}} t + F\left(\frac{\pi z_0}{\lambda}, \kappa^2\right), \kappa^2\right). \quad (2.8)$$

Případ vázaných elektronů ($\kappa > 1$) vyřešíme převedením na úlohu s nulovou počáteční rychlostí. Vázanost elektronu znamená, že pro počáteční polohu $z_0 \in (-\lambda/2, \lambda/2)$ bude v každém čase platit $q(t) \in (-\lambda/2, \lambda/2)$. Víme tedy, že v tomto intervalu budou existovat 2 body obratu, které lze popsat relací

$$\dot{q}(t) = 0 \implies |q(t)| = q_{max}.$$

Souřadnici q_{max} najdeme jednoduše řešením rovnice

$$U_p(q = q_{max}) - U_p(q = z_0) = \frac{1}{2} m \delta v_0^2,$$

tedy hledáním bodu, ve kterém byla všechna kinetická energie (v klidové soustavě) využita na vystoupení v potenciálu. Řešením je souřadnice

$$q_{max} = \frac{\lambda}{\pi} \arcsin \sqrt{\frac{m \delta v_0^2}{2A} + \sin^2 \frac{\pi z_0}{\lambda}} = \frac{\lambda}{\pi} \arcsin \frac{1}{\kappa}. \quad (2.9)$$

Trajektorii vázaných elektronů najdeme tak, že budeme řešit rovnici (2.2) s počátečními podmínkami

$$q(t = t_0) = q_{max} \implies \dot{q}(t = t_0) = 0 \quad (2.10)$$

v nějakém čase t_0 a od výsledného řešení budeme požadovat splnění podmínek (2.3), čímž dostaneme vztah pro t_0 (tedy pro časový rozestup mezi počátkem a

nejbližším bodem obratu). Při řešení vyjdeme ze vztahu (2.4), který pro podmínky (2.10) získá tvar

$$(\dot{q}(t))^2 = \frac{2A}{m} \left(\sin^2 \frac{\pi q_{max}}{\lambda} - \sin^2 \frac{\pi q(t)}{\lambda} \right). \quad (2.11)$$

Tuto rovnici se vyplatí, stejně jako v článku (Beléndez a kol., 2007), upravit na tvar, který povede po separaci proměnných na eliptický integrál v tzv. Legendreově normálním tvaru. Nejprve pro přehlednost přeškálujeme trajektorii $Q(t) \equiv \pi q(t)/\lambda$ a následně provedeme substituci

$$\phi(t) = \sin Q(t) \implies (\dot{\phi}(t))^2 = (\dot{Q}(t))^2 \cos^2 Q(t) = (1 - \phi^2(t))(\dot{Q}(t))^2.$$

Tím od rovnice (2.11) přejdeme k

$$(\dot{\phi}(t))^2 = \frac{2A}{m} \left(\frac{\pi}{\lambda} \right)^2 (1 - \phi^2(t))(k^2 - \phi^2(t)),$$

kde jsme označili $k^2 = \sin^2(\pi q_{max}/\lambda)$. Dodatečné přeškálování $\varphi(t) \equiv \phi(t)/k$ a odmocnění pak vede na rovnici

$$|\dot{\varphi}(t)| = \sqrt{\frac{2A}{m}} \frac{\pi}{\lambda} \sqrt{(1 - k^2 \varphi^2(t))(1 - \varphi^2(t))}. \quad (2.12)$$

Od výsledného řešení budeme požadovat platnost podmínek (2.3) a vyčíslením vztahu (2.12) v $t = 0$ (po zpětném dohledání substitucí) dostaneme

$$\frac{\pi}{\lambda k} \cos \frac{\pi z_0}{\lambda} \delta v_0 = \pm \sqrt{\frac{2A}{m}} \frac{\pi}{\lambda} \sqrt{1 - \sin^2 \frac{\pi z_0}{\lambda}} \sqrt{1 - \frac{\sin^2 \frac{\pi z_0}{\lambda}}{k^2}}.$$

Jelikož víme, že pro $z_0 \in (-\lambda/2, \lambda/2)$ je $\cos(\pi z_0/\lambda) > 0$ a zároveň

$$k = \sin \frac{\pi q_{max}}{\lambda} > \left| \sin \frac{\pi z_0}{\lambda} \right|,$$

tak vidíme, že bude opět znaménko po odstranění absolutní hodnoty v (2.12) určeno pomocí $\text{sgn}(\delta v_0)$. Provedením separace proměnných a vyintegrováním tak dostaneme

$$\int_{\varphi(t_0)}^{\varphi(t)} \frac{d\theta}{\sqrt{(1 - k^2 \theta^2)(1 - \theta^2)}} = \text{sgn}(\delta v_0) \sqrt{\frac{2A}{m}} \frac{\pi}{\lambda} (t - t_0),$$

kde se vyplatí si uvědomit, že dle podmínek (2.10) platí

$$\varphi(t_0) = \frac{\sin \frac{\pi q_{max}}{\lambda}}{k} = 1.$$

Roztržením mezí integrace a identifikací příslušných eliptických integrálů (musíme vzít v potaz, že jsou eliptické integrály v Legendreově normálním tvaru) dostaneme rovnici

$$F(\arcsin \varphi(t), k^2) = K(k^2) + \text{sgn}(\delta v_0) \sqrt{\frac{2A}{m}} \frac{\pi}{\lambda} (t - t_0),$$

kde $K(k^2)$ značí úplný eliptický integrál prvního druhu s hodnotou parametru k^2 . Rovnici vyčíslíme v čase $t = 0$ a dosadíme podmínky (2.3), čímž získáme vztah pro t_0

$$t_0 = \operatorname{sgn}(\delta v_0) \frac{\lambda}{\pi} \sqrt{\frac{m}{2A}} \left(K(k^2) - F \left(\arcsin \left(\frac{\sin \frac{\pi z_0}{\lambda}}{k} \right), k^2 \right) \right).$$

Zbývá nám tedy invertovat rovnici ve tvaru

$$F(\arcsin \varphi(t), k^2) = \operatorname{sgn}(\delta v_0) \sqrt{\frac{2A}{m}} \frac{\pi}{\lambda} t + F \left(\arcsin \left(\frac{\sin \frac{\pi z_0}{\lambda}}{k} \right), k^2 \right), \quad (2.13)$$

k čemuž se nám bude hodit další z Jacobiho eliptických funkcí, $sn(x, m)$ (viz Olver a kol., 2010), kterou lze zavést následujícími ekvivalentními způsoby

$$F(\arcsin \phi, m) = x \implies \sin \phi = sn(x, m), \quad sn(x, m) = \sin am(x, m).$$

Lze nahlédnout, že parametry k a κ , které jsme při řešení používali, mezi sebou mají jednoduchý vztah. Z (2.9) totiž plyne

$$k = \sin \frac{\pi q_{max}}{\lambda} = \frac{1}{\kappa}.$$

Invertování rovnice (2.13) tak vede, po dohledání (a inverzi) všech dílčích substitucí, na vyjádření trajektorie vázaných elektronů ($\kappa > 1$) v klidové soustavě potenciálu (2.1)

$$q(t) = \frac{\lambda}{\pi} \arcsin \left\{ \frac{1}{\kappa} sn \left[\operatorname{sgn}(\delta v_0) \frac{\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{2A}{m}} t + F \left(\arcsin \left(\kappa \sin \frac{\pi z_0}{\lambda} \right), \frac{1}{\kappa^2} \right), \frac{1}{\kappa^2} \right] \right\}. \quad (2.14)$$

2.2 Vlastnosti řešení

V této části krátce nahlédneme na některé vlastnosti trajektorií volných a vázaných elektronů, které jsme popsali pomocí vztahů (2.8) a (2.14). Klíčové budou zejména základní matematické vlastnosti Jacobiho eliptických funkcí $am(x, m)$ a $sn(x, m)$. Vlastnostmi plynoucími z fyzikálních parametrů se budeme zabývat více v následující části.

„Kostru“ trajektorií tvoří funkce

$$y_f(x) = am(x, m),$$

$$y_b(x) = \arcsin \left[\sqrt{p} sn \left(\frac{x}{\sqrt{p}}, p \right) \right],$$

kde index f značí volnou trajektorii, index b trajektorii vázanou a pro jejich určující parametry platí $m, p \in (0, 1)$. Škálování faktorem \sqrt{p} v zavedení $y_b(x)$ není bezdůvodné, je zde z důvodu transformační identity (viz Olver a kol., 2010)

$$sn \left(x, \frac{1}{p} \right) = \sqrt{p} sn \left(\frac{x}{\sqrt{p}}, p \right).$$

Funkci $y_b(x)$ tak lze velmi hrubě chápat jako „spojitý, reálný a omezený ekvivalent“ eliptické funkci $am\left(x, \frac{1}{p}\right)$ pro $p \in (0, 1)$. Nahlédnutím na nalezené trajektorie (2.8) a (2.14) vidíme, že jsou spojeny přesně skrze tuto transformaci, pokud si uvědomíme, že i neúplný eliptický integrál prvního druhu splňuje obdobnou transformaci (viz Olver a kol., 2010)

$$F\left(x, \frac{1}{k}\right) = \sqrt{k} F\left[\arcsin\left(\frac{\sin x}{\sqrt{k}}\right), k\right].$$

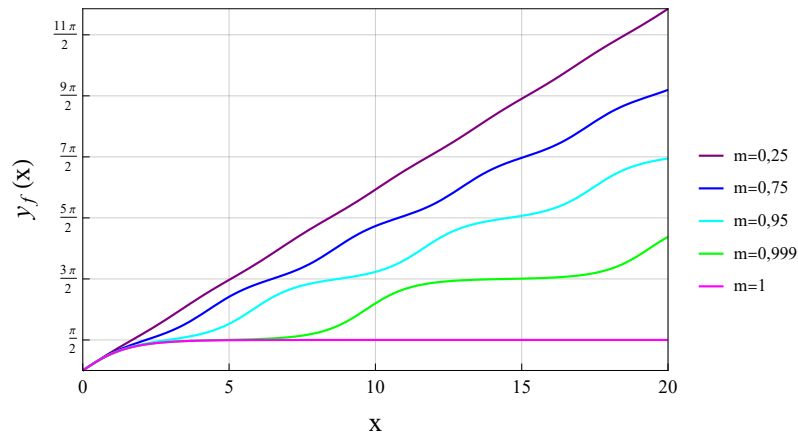
Na obrázcích 2.1 a 2.2 máme vykresleny křivky $y_f(x)$ a $y_b(x)$ pro několik hodnot parametrů $m, p \in (0, 1)$, které určují jejich tvar. Z grafů vidíme, že nejzajímavější chování mají křivky příslušející hodnotám m a p blízkým jedné. V případě nevázané křivky $y_f(x)$ tyto hodnoty odpovídají „těsnému překmitnutí“ do další prostorové periody a v případě křivky $y_b(x)$ se jedná o „hraniční vázanost“. Zároveň vidíme, že v limitním případě $m = p = 1$ křivky splynou a představují trajektorii částice, která přesně vystoupá do vrcholu potenciálu, kde se zastaví.

Důležitou vlastností, kterou budeme v analýze s konkrétními fyzikálními parametry využívat, je periodičita. Funkce $am(x, m)$ je pro $m \in (0, 1)$ spojitá a monotónní v proměnné x a pseudoperiodická s periodou $2K(m)$. Platí tedy (viz Olver a kol., 2010)

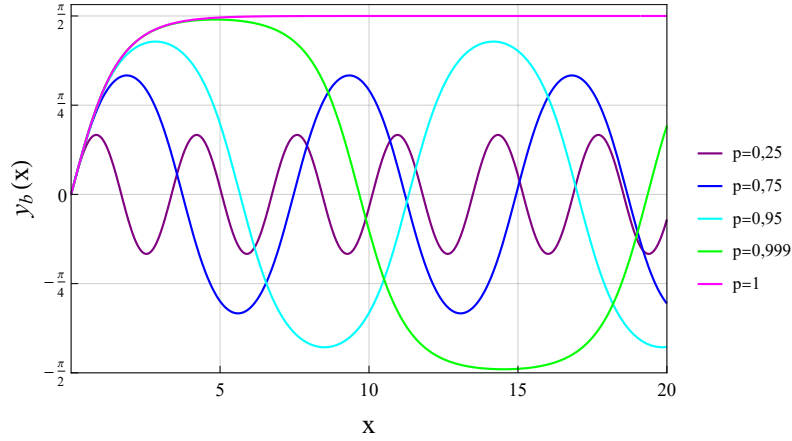
$$am(x + 2K(m), m) = am(x, m) + \pi.$$

Nahlédneme-li na vztah popisující nevázanou trajektorii (2.8), tak vidíme, že posun o π v naší situaci přesně odpovídá přecestování elektronu na totožné místo ve vedlejší prostorové periodě potenciálu.

Funkce $sn(x, m)$ je pro $m \in (0, 1)$ spojitou a reálnou funkcí s funkčními hodnotami v intervalu $\langle -1, 1 \rangle$ a periodou $4K(m)$. Díky tomu, že je arcsin na intervalu $\langle -1, 1 \rangle$ prostý, tak bude složená funkce popisující vázanou trajektorii $y_b(x)$ periodická právě s periodou $4K(m)$, což je výsledek, který je známý pro nepřetáčející se matematické kyvadlo (viz Beléndez a kol., 2007).



Obrázek 2.1: Graf řešení odpovídajících nevázaným trajektoriím v bezrozměrné úloze pro několik hodnot určujícího parametru m .



Obrázek 2.2: Graf řešení odpovídajících vázaným trajektoriím v bezrozměrné úloze pro několik hodnot určujícího parametru p .

2.3 Teoretické předpovědi pro dynamiku elektronů

Podívejme se nyní na důsledky, které plynou z analytického řešení pohybové rovnice, pokud uvážíme specifické provedení experimentu. V další části budeme chtít simulovat předpokládanou dynamiku distribuce elektronů v reálném prostoru a v prostoru energií, a tak je třeba zvolit vhodné hodnoty fyzikálních parametrů. Budeme se proto věnovat některým důležitým vlastnostem dynamiky, jako je maximální možná změna kinetické energie elektronů a také vhodně interpretujeme podmínku $\kappa > 1$ pro zachycení elektronů do jedné periody.

Identifikujme nejprve volné parametry v ponderomotorickém potenciálu. Přechod od obecného vyjádření ponderomotorického potenciálu (1.10) v uvažovaném geometrickém uspořádání ke tvaru potenciálu (2.1) byl proveden volbou

$$konst \equiv \frac{2q^2 E_0^2}{m(\omega_1 + \omega_2)^2}, \quad \varphi_2 - \varphi_1 \equiv \pi$$

a označením

$$A \equiv \frac{4q^2 E_0^2}{m(\omega_1 + \omega_2)^2}, \quad v_g \equiv c \frac{\omega_1 - \omega_2}{\omega_1 + \omega_2}, \quad \lambda \equiv \frac{2\pi c}{\omega_1 + \omega_2}.$$

Budeme předpokládat, že experimentální uspořádání pro generování laserových pulzů je takové, že frekvence ω_1 a ω_2 nejsou zcela nezávislé. Experimentálním příkladem takové situace může být metoda znázorněná v práci (Kozák a kol., 2018b), kde byla použita optická parametrická generace a pro součet energií fotonů z obou vln platilo $\hbar(\omega_1 + \omega_2) = \hbar\omega_0$, kde ω_0 byla frekvence čerpacího svazku parametrického zesilovače. My se ale zaměříme na situaci¹, kdy jsou laserové pulzy s frekvencemi ω_1 a ω_2 generovány jako třetí a druhá harmonická frekvence femtosekundového laserového pulzu se základní frekvencí ω_0 . Uvažme tedy, že platí $\omega_1 = 3\omega_0$ a $\omega_2 = 2\omega_0$. Ihned vidíme, že bude za tohoto předpokladu platit

¹Experiment, který odpovídá tomuto uspořádání, je v současné době měřen na FAU, Erlangen-Nürnberg.

$v_g = c/5$ a $\lambda = (2\pi c)/(5\omega_0) \equiv \lambda_0/5$, kde λ_0 značí vlnovou délku původního laserového pulzu. Velikost synchronní rychlosti v_g je důležitá z hlediska uvažovaného nerelativistického² popisu. Pro interakci probíhající ve vakuu tak budou amplituda a prostorová perioda potenciálu určeny pouze vlnovou délkou a intenzitou původního laserového pulzu.

V sekci 1.6 jsme diskutovali, že klasická aproximace studované interakce má smysl pro podélnou koherentní délku elektronového svazku srovnatelnou s prostorovou periodou ponderomotorického potenciálu. Uvažme proto pro jednoduchost konstantní distribuci elektronů na intervalu $(-\frac{\lambda}{2}, \frac{\lambda}{2})$, který odpovídá jedné prostorové periodě. Distribuci elektronů v prostoru energií budeme charakterizovat přes rozdíl počáteční kinetické energie (vyjádřený v laboratorní soustavě) oproti synchronnímu případu, kdy platí $\delta v_0 = 0$. Pro tento rozdíl platí

$$\Delta E_0 \equiv \frac{1}{2} m [(v_g + \delta v_0)^2 - v_g^2] = \frac{m\delta v_0}{2} (\delta v_0 + 2v_g). \quad (2.15)$$

Pokud chceme později diskutovat možnosti využití interakce ke kontrolovanému urychlení souboru elektronů, tak dává smysl uvažovat případ $\Delta E_0 \leq 0$. Vyjádřením δv_0 z rovnice (2.15) dostaneme

$$\delta v_0 = -v_g \pm \sqrt{v_g^2 + \frac{2\Delta E_0}{m}}.$$

Naši fyzikální situaci odpovídá řešení se znaménkem $+$, jelikož počáteční rozdíl oproti synchronní rychlosti uvažujeme jistě $|\delta v_0| < |v_g|$. Samozřejmě nám výraz pod odmocninou dává také restrikcí na hodnotu ΔE_0 , pokud ji budeme uvažovat zápornou. Restrikce odpovídá nerovnosti

$$|\Delta E_0| < \frac{1}{2} m v_g^2 \equiv E_g,$$

kteřá bude u dále uvažovaných hodnot také splněna, jelikož hodnota synchronní kinetické energie elektronu E_g , odpovídající rychlosti $v_g = 0,2c$, je $E_g \doteq 10,5$ keV.

Elektronové pulzy jsou v experimentálním uspořádání (Kozák a kol., 2018b) generovány pomocí fotoemise, která je buzena ultrafialovými laserovými pulzy dopadajícími na katodu elektronového mikroskopu. Energetickou distribuci takto generovaných elektronů lze poměrně přesně charakterizovat Gaussovým rozdělením, jak se můžeme přesvědčit např. v práci (Feist a kol., 2017). Kinetickou energii elektronů (pro nás podstatnou střední hodnotu ΔE_0) lze takto zvolit (samozřejmě v rozmezí podmíněném aparaturou) nezávisle na následné interakci. Nicméně musíme vzít v potaz, že se v popisu omezujeme na $|\delta v_0| \ll |v_g|$, abychom mohli uvažovat tvar potenciálu (2.1).

V části 2.2 jsme diskutovali periodicitu nalezených trajektorií. Víme tedy, že v případě vázaných i nevázaných elektronů bude vývoj jejich rychlosti v klidové soustavě periodický (pseudoperiodická nevázaná trajektorie se posune během periody o konstantu). Časově závislý rozdíl kinetické energie oproti synchronní situaci

$$\Delta E(t) = \frac{1}{2} m [(v_g + \dot{q}(t))^2 - v_g^2], \quad (2.16)$$

²Míra chyby vzniklé použitím Galileovy transformace mezi vztažnými soustavami a zanedbáním γ faktoru v Lorentzově transformaci pole (1.4) tak jde kvantifikovat skrze hodnotu odpovídajícího $\gamma_{v_g} \doteq 1,021$.

tak bude rovněž oscilovat v čase s periodou, kterou umíme na základě analytického řešení pro dané fyzikální parametry explicitně vyjádřit. Krajiní hodnoty $\Delta E(t)$, tedy minimální a maximální kinetickou energii elektronu během interakce, lze jednoduše určit z prvního integrálu pohybové rovnice ve tvaru (2.5). Během řešení pohybové rovnice (v části 2.1) jsme využili toho, že elektrony vázané na jednu periodu potenciálu jsou charakterizovány parametrem $\kappa > 1$ a existují pro ně dva body obratu, ve kterých je jejich rychlost $\dot{q}(t)$ v klidové soustavě potenciálu nulová. Oproti tomu nevázané elektrony, charakterizované $\kappa < 1$, se nikdy vůči klidové soustavě potenciálu nezastaví. Na základě vztahu (2.5) nám tyto úvahy umožňují souhrnně určit krajiní hodnoty \dot{q}_{min} a \dot{q}_{max} , viz tabulka 2.1.

	$\kappa > 1$		$\kappa < 1$	
	\dot{q}_{min}	\dot{q}_{max}	\dot{q}_{min}	\dot{q}_{max}
$\delta v_0 > 0$	$-\frac{1}{\kappa} \sqrt{\frac{2A}{m}}$	$\frac{1}{\kappa} \sqrt{\frac{2A}{m}}$	$\sqrt{\frac{2A}{m} \frac{1-\kappa^2}{\kappa^2}}$	$\frac{1}{\kappa} \sqrt{\frac{2A}{m}}$
$\delta v_0 < 0$	$-\frac{1}{\kappa} \sqrt{\frac{2A}{m}}$	$\frac{1}{\kappa} \sqrt{\frac{2A}{m}}$	$-\frac{1}{\kappa} \sqrt{\frac{2A}{m}}$	$-\sqrt{\frac{2A}{m} \frac{1-\kappa^2}{\kappa^2}}$

Tabulka 2.1: Tabulka shrnující meze rychlosti v klidové soustavě pro vázané ($\kappa > 1$) a nevázané elektrony ($\kappa < 1$), které jsou oproti potenciálu urychlené/zpomalené.

Tím se potvrzuje očekávání, že nejvíce kinetické energie má při interakci možnost získat třída elektronů, které byly na počátku oproti potenciálu zpomaleny a zároveň jejich trajektorie splňují podmínku vázanosti $\kappa > 1$. Krajiní hodnota oscilujícího rozdílu energie $\Delta E(t)$, viz (2.16), je pro vázaný elektron dána

$$\Delta E_{max} = \frac{A + \kappa v_g \sqrt{2Am}}{\kappa^2}.$$

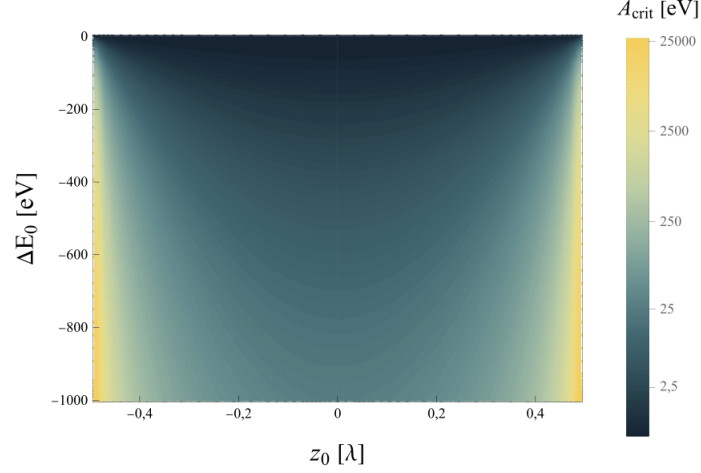
Upravíme-li tvar zavedeného parametru κ na

$$\kappa^2 = \frac{1}{\frac{m\delta v_0^2}{2A} + \sin^2 \frac{\pi z_0}{\lambda}},$$

tak vidíme, že pro libovolné počáteční podmínky $z_0, \delta v_0$ (vyjma $z_0 = \pm\lambda/2$) lze od určité hraniční velikosti amplitudy A_{crit} dosáhnout vázanosti (tedy $\kappa > 1$). Krajiní velikost amplitudy A_{crit} lze z podmínky $\kappa = 1$ vyjádřením δv_0 (ΔE_0) popsat jako funkci počáteční polohy a počátečního rozdílu kinetické energie elektronu oproti synchronnímu případu

$$A_{crit}(z_0, \Delta E_0) = \frac{m}{2 \cos^2 \left(\frac{\pi z_0}{\lambda} \right)} \left(\sqrt{v_g^2 + \frac{2\Delta E_0}{m}} - v_g \right)^2. \quad (2.17)$$

Z obrázku 2.3 vidíme, že nárůst A_{crit} ovlivňuje především změna uvažované počáteční polohy, zatímco závislost na ΔE_0 je asymptoticky lineární.



Obrázek 2.3: Graf, který na logaritmické škále ilustruje závislost velikosti amplitudy A_{crit} potřebné k zachycení elektronu, o počáteční poloze z_0 a rozdílu kinetické energie oproti synchronnímu případu ΔE_0 , do jedné prostorové periody ponderomotorického potenciálu.

2.4 Simulace časového vývoje pro konkrétní fyzikální parametry

V této sekci zvolíme konkrétní sadu fyzikálních parametrů a následně vizualizujeme evoluci distribuce elektronů. Pro vybrané rozdělení počátečních kinetických energií najdeme vhodnou amplitudu potenciálu kladením požadavku na určitý podíl elektronů zachycených v jedné periodě. Ve všech simulacích budeme předpokládat, že původní femtosekundový laserový pulz, ze kterého v experimentu vznikají protichůdné optické vlny generováním třetí a druhé harmonické frekvence, má vlnovou délku $\lambda_0 = 1030$ nm. Jelikož amplituda ponderomotorického potenciálu stále závisí na intenzitě laseru, tak předpokladem pouze fixujeme prostorovou periodu na $\lambda = 206$ nm.

Nejprve se budeme zabývat režimem slabé interakce, ve kterém je rozdíl kinetické energie oproti synchronnímu případu v řádu jednotek eV, a výsledky porovnáme se synchronním případem. Jak bylo zmíněno již v předchozí části, tak pro veličinu ΔE_0 budeme v našem souboru elektronů uvažovat Gaussovu distribuci, popsanou normalizovanou distribuční funkcí

$$f(\Delta E_0) = \frac{1}{\sigma_E \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(\Delta E_0 - \mu_E)^2}{2\sigma_E^2} \right],$$

kde μ_E značí střední hodnotu a σ_E směrodatnou odchylku. Místo parametru σ_E budeme specifikovat šířku distribuční funkce v polovině maxima (v literatuře *Full Width at Half Maximum*), pro kterou platí $\text{FWHM}_E = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma_E$.

Zvolme tedy dvě normální rozdělení s totožnými šířkami $\text{FWHM}_E = 0,5$ eV a středními hodnotami $\mu_E^{(s)} = 0$ eV a $\mu_E^{(a)} = -9$ eV, kde pomocí horních indexů naznačujeme, že se jedná o synchronní a asynchronní případ. Abychom určili vhodnou amplitudu potenciálu, tak nejprve vykreslíme závislost podílu elektronů zachycených do jedné periody na velikosti amplitudy za uvažovaných rozdělení

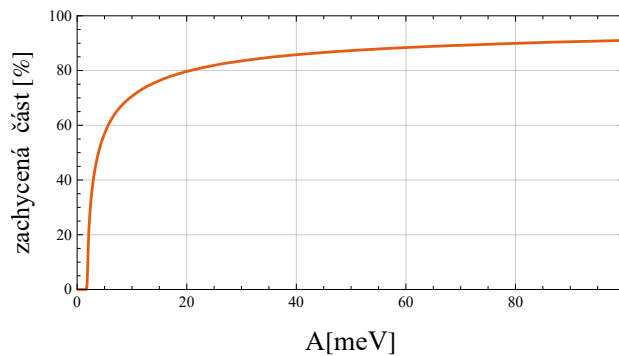
počátečních podmínek pro asynchronní případ. Pro každý elektron vygenerujeme počáteční polohu z konstantního rozdělení v intervalu $z_0 \in \left(-\frac{\lambda}{2}, \frac{\lambda}{2}\right)$ a počáteční rozdíl energie oproti synchronnímu případu z normálního rozdělení o parametrech FWHM_E a $\mu_E^{(a)}$. Ke každé dvojici počátečních podmínek vyčíslíme velikost amplitudy A_{crit} (viz (2.17)) potřebnou k „uvěznění“ elektronu do jedné periody potenciálu. Relativní kumulativní četnost hodnot A_{crit} bude pak, za dostatečně velkého množství generovaných počátečních podmínek, odpovídat podílu zachycených elektronů.

Z obrázku 2.4 pozorujeme, že podíl vázaných elektronů nejprve na intervalu $A \in \langle 0, 20 \text{ meV} \rangle$ strmě roste a pro vyšší velikosti amplitudy se růst zásadně zpomaluje. Zvolíme proto pro následné numerické simulace amplitudu $A = 30 \text{ meV}$, která odpovídá přibližně 85% podílu zachycených elektronů. Pro tuto hodnotu amplitudy si z rozdělení počátečních podmínek můžeme sestavit hustotu pravděpodobnosti (normalizovanou distribuční funkci) $f_N(T)$ periody T oscilací pro elektrony s různými počátečními podmínkami, kterou později využijeme při interpretaci znázorněné dynamiky. Z částí 2.1 a 2.2 víme, že je perioda dána vztahem

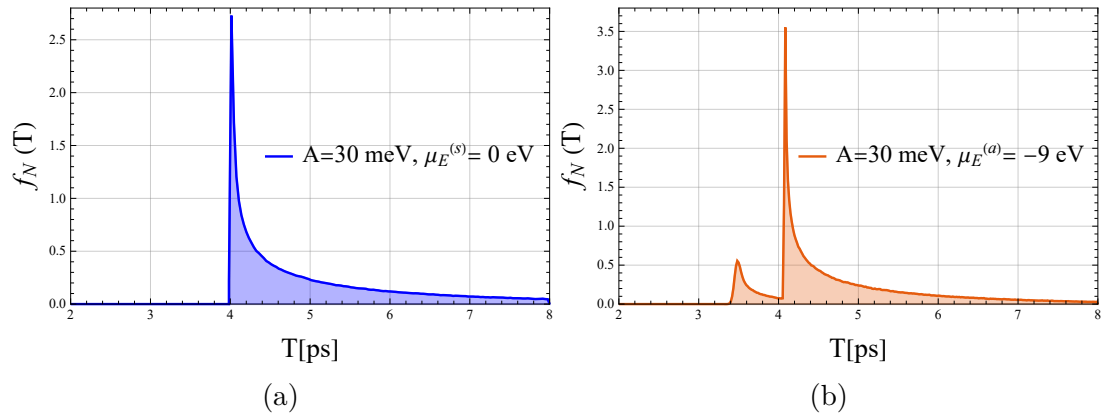
$$T = \begin{cases} \frac{\lambda\kappa}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{A}} K(\kappa^2), & \text{je-li } \kappa(z_0, \Delta E_0) < 1, \\ \frac{2\lambda}{\pi} \sqrt{\frac{2m}{A}} K\left(\frac{1}{\kappa^2}\right), & \text{je-li } \kappa(z_0, \Delta E_0) > 1. \end{cases} \quad (2.18)$$

Z vykreslených distribučních funkcí $f_N(T)$ pro synchronní a asynchronní případ, viz obrázek 2.5, vidíme, že v synchronním režimu dostáváme pro uvažované rozdělení počátečních podmínek jeden významný pík, a to konkrétně na hodnotě $T \doteq 4,008 \text{ ps}$. Pokud bychom potenciál (2.1) nahradili parabolickou aproximací (rozvojem funkce \cos do druhého řádu), tak by rovnice (2.2) přešla na linearizovanou verzi matematického kyvadla, pro níž jednoduše vyjádříme periodu trajektorie $T_{lin} = \lambda\sqrt{2m/A}$. Vyčíslením periody linearizované trajektorie zjistíme, že dle očekávání odpovídá nalezenému píku. V asynchronním režimu vidíme, že se hlavní pík zúžil a mírně posunul, ale zároveň vznikl méně ostrý pík na menší hodnotě T , u něhož čekáme, že přísluší nevázaným elektronům.

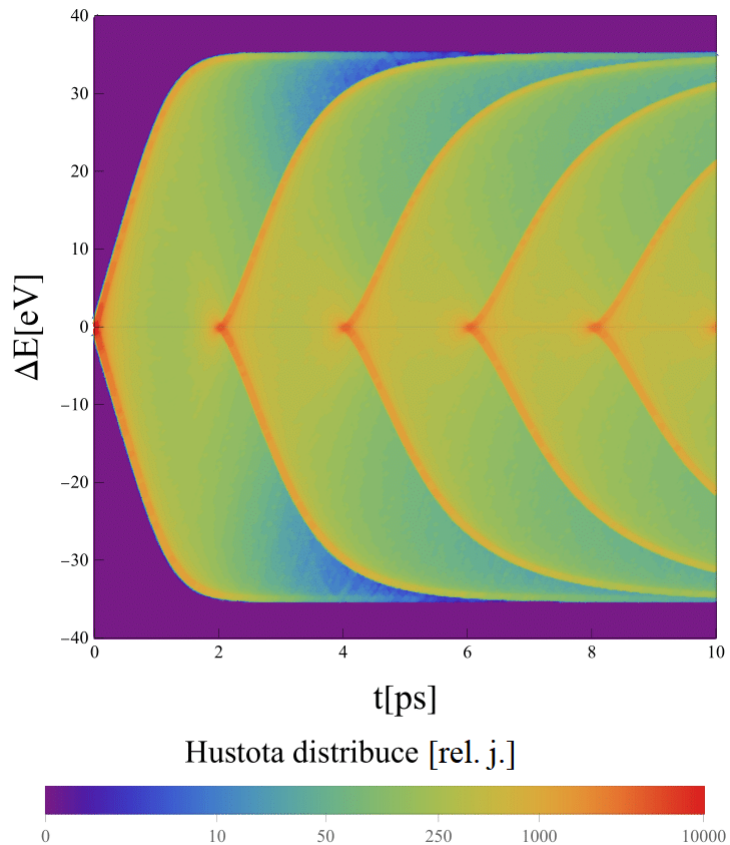
Evoluce distribucí elektronů v reálném prostoru i v prostoru energií vykreslíme v softwaru *Wolfram Mathematica*, jelikož má v sobě implementovány Jacobiho eliptické funkce i jejich derivace, které se vyskytují v nalezených trajektoriích (2.8) a (2.14). Vizualizaci tak bude možno provést pro řádově 10^5 elektronů.



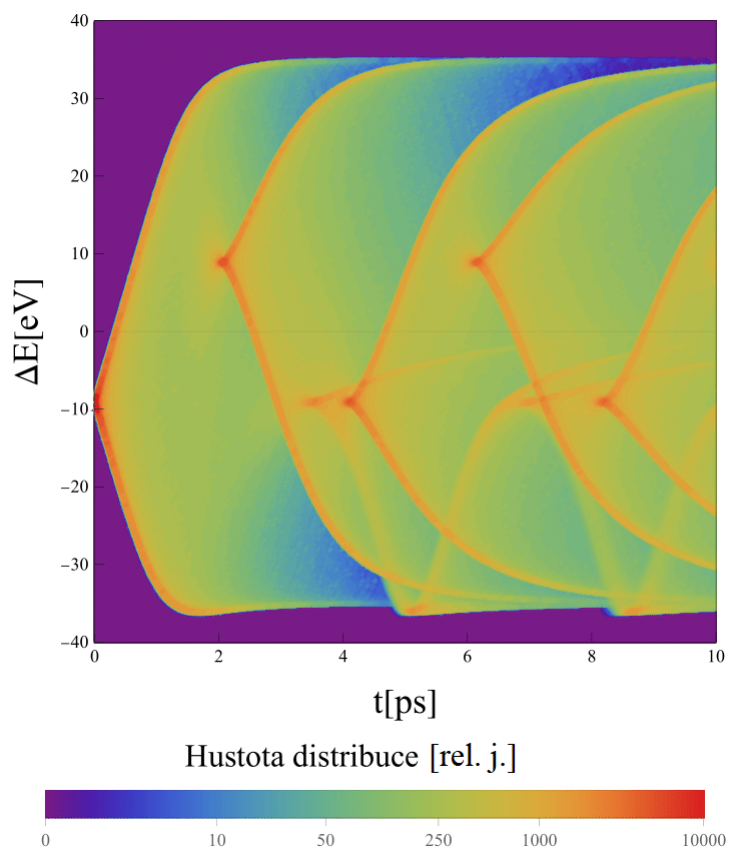
Obrázek 2.4: Závislost podílu zachycených elektronů na velikosti amplitudy potenciálu pro případ normálního rozdělení ΔE_0 s $\mu_E^{(a)} = -9 \text{ eV}$ a $\text{FWHM}_E = 0,5 \text{ eV}$.



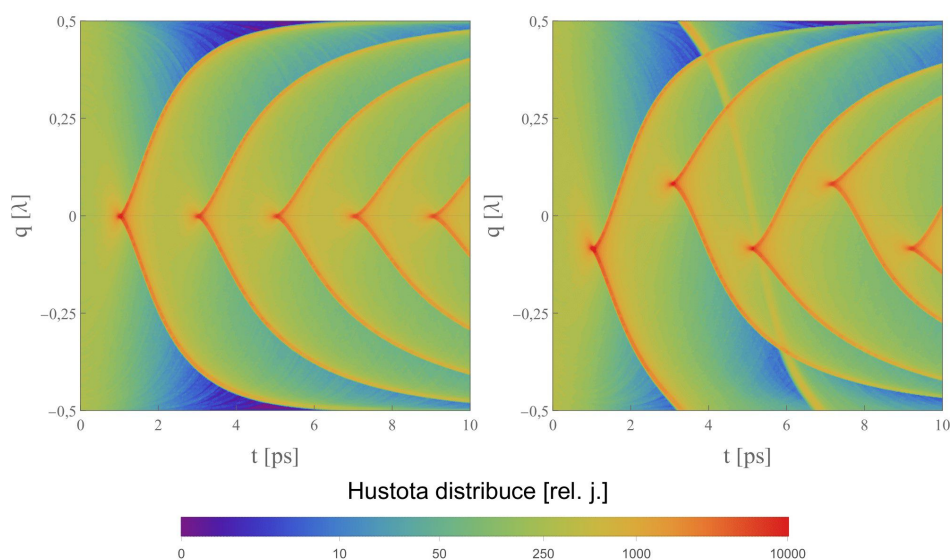
Obrázek 2.5: Normalizované distribuční funkce $f_N(T)$ periody T na souboru elektronů pro (a) synchronní případ $\mu_E^{(s)} = 0$ eV a (b) asynchronní případ $\mu_E^{(a)} = -9$ eV se shodnými šířkami rozdělení energií $\text{FWHM}_E = 0,5$ eV.



Obrázek 2.6: Časový vývoj hustoty distribuce elektronů v prostoru energií v rámci synchronního režimu interakce s počáteční šířkou rozdělení energií $\text{FWHM}_E = 0,5$ eV a amplitudou potenciálu $A = 30$ meV.



Obrázek 2.7: Časový vývoj hustoty distribuce elektronů v prostoru energií v rámci asynchronního režimu interakce s počátečním rozdělením rozdílové energie o střední hodnotě $\mu_E^{(a)} = -9 \text{ eV}$ a šířce $\text{FWHM}_E = 0,5 \text{ eV}$ při velikosti amplitudy potenciálu $A = 30 \text{ meV}$.

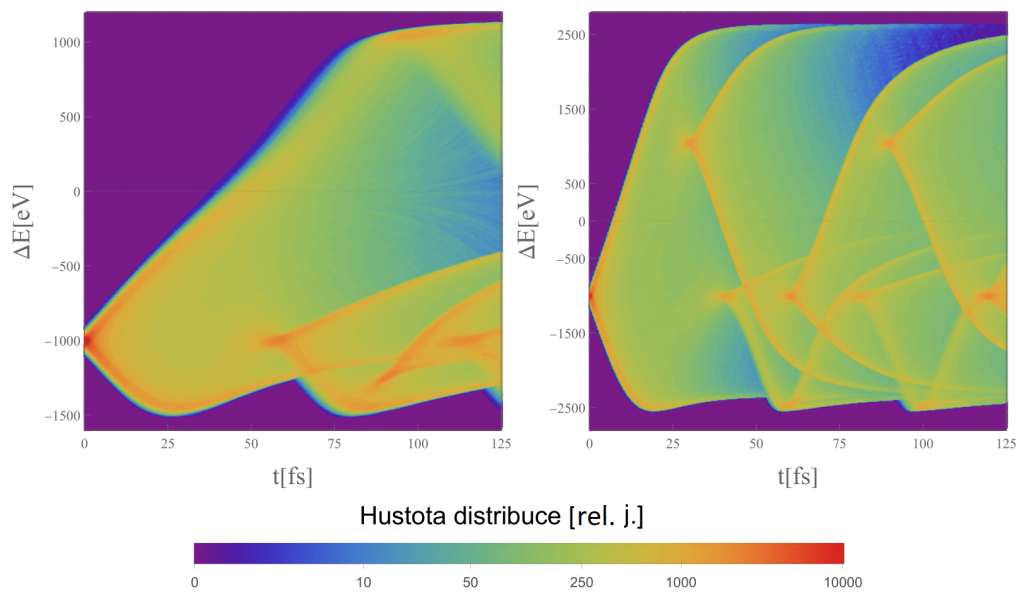


Obrázek 2.8: Srovnání časových vývoji hustot distribucí elektronů v reálném prostoru v synchronním režimu (vlevo) a v asynchronním režimu (vpravo) interakce. Fyzikální parametry odpovídají evoluci distribucí na obrázcích 2.6 a 2.7.

Na obrázku 2.6 vidíme, že v synchronním režimu interakce skutečně dochází v rámci našeho modelu k periodické fokusaci a opětovnému rozšíření časově závislé distribuce elektronů v prostoru energií. Perioda je v tomto režimu, pochopitelně, poloviční oproti periodě celkového pohybu, což je způsobeno symetrií trajektorie podle minima potenciálu (analogicky k matematickému kyvadlu vypuštěnému z klidu). Zajímavější situace nastává v asynchronním režimu, viz obrázek 2.7, kde pozorujeme po prvotním rozostření distribuce opětovné periodické fokusování, ale tentokrát střídavě na kladných a záporných hodnotách ΔE . Zastavení interakce v čase, který odpovídá ostrému píku na kladné hodnotě ΔE (z obrázku 2.5b víme, že tento čas odpovídá přibližně polovině linearizované periody), tak povede k úzké energetické distribuci urychlených elektronů. Díky logaritmické barevné škále také pozorujeme v dolní polovině obrázku 2.7 část distribuce oscilující s kratší časovou periodou pouze na záporných hodnotách ΔE . Tato část odpovídá nevázaným elektronům (energetické meze lze stanovit dosazením z tabulky 2.1 do vztahu (2.16)) a oscilace probíhají s periodou odpovídající menšímu píku z obrázku 2.5b.

Zároveň jsme na obrázku 2.8 vizualizovali evoluce distribucí elektronů v reálném prostoru pro synchronní a asynchronní režim interakce. Vidíme, že v synchronním režimu probíhá s očekávanou periodou fokusace distribuce v minimum potenciálu a její následné rozšiřování. Oproti tomu v asynchronním případě vidíme, že zaostření distribuce probíhá mimo minimum potenciálu, střídavě na kladné a záporné souřadnici v klidové soustavě. Díky logaritmické škále je zároveň na obrázku patrná třída elektronů, které přecestovaly z vedlejší prostorové periody. Opět ve srovnání s obrázkem 2.7 rozpoznáme, že v časovém vývoji zaostření distribuce v reálném prostoru odpovídá rozostření v prostoru energií a vice versa.

Pro srovnání ještě vykreslíme evoluci distribuce elektronů v režimu silné interakce, kdy je počáteční rozdíl energie oproti synchronnímu případu větší a následná modulace kinetické energie elektronu v důsledku interakce také. Chceme ilustrovat zejména vliv vybrané velikosti amplitudy potenciálu na chování časového vývoje. Zvolme normální rozdělení veličiny ΔE_0 s parametry $\mu_E^{(a)} = -1$ keV a $\text{FWHM}_E = 50$ eV. Sestrojíme-li graf analogický obrázku 2.4, tak zjistíme, že nárůst podílu zachycených elektronů zpomaluje mnohem rychleji než v případě slabé interakce. Například 80% podíl zachycených elektronů odpovídá až velikosti amplitudy 260 eV. Pro ilustraci rozdílu způsobeného volbou amplitudy tak zvolíme v jednom případě $A = 30$ eV odpovídající 25% podílu a ve druhém případě $A = 150$ eV odpovídající 72% podílu elektronů zachycených do jedné periody. Z obrázku 2.9 vidíme, že při velikosti amplitudy $A = 30$ eV nedojde k zachycení dostatečného množství elektronů na to, aby se na kladných hodnotách ΔE utvořil ostrý pík distribuce elektronů. Oproti tomu v případě amplitudy $A = 150$ eV pozorujeme dynamiku analogickou situaci znázorněné na obrázku 2.7 s tím rozdílem, že vlivem menšího podílu zachycených elektronů jsou píky méně ostré. Dynamika v režimu silné interakce probíhá na kratších časových škálách, v 75% podílu vázaných elektronů bychom (analogicky jako při vykreslení obrázku 2.5) zjistili, že perioda časového vývoje je přibližně $T \doteq 60$ fs.



Obrázek 2.9: Srovnání časových vývoje hustot distribucí elektronů v prostoru energií při normálním rozdělení ΔE_0 s parametry $\mu_E^{(a)} = -1$ keV a $\text{FWHM}_E = 50$ eV. Obrázek nalevo odpovídá amplitudě potenciálu $A = 30$ eV a obrázek napravo amplitudě $A = 150$ eV.

3. Kvantový model

V této kapitole se budeme zabývat náhledem na interakci elektronu s ponderomotorickým potenciálem skrze kvantově mechanický popis. Budeme pracovat s potenciálem v odvozeném klasickém tvaru (2.1) a evoluci budeme zkoumat od začátku v jeho klidové soustavě. Nejprve se budeme věnovat popisu dynamiky v jedné prostorové periodě užitím parabolické aproximace. Následně budeme pomocí Blochova teorému a vhodné unitární transformace studovat interakci elektronu, který byl na počátku ve stavu s ostrou hladinou hybnosti, s plným periodickým potenciálem.

3.1 Popis dynamiky kvantového systému

Nerelativistickou dynamiku kvantového systému popisuje časová Schrödingerova rovnice

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\psi(t)\rangle, \quad (3.1)$$

kde $|\psi(t)\rangle$ značí časově závislý stavový vektor našeho systému a \hat{H} je jeho Hamiltonián, který může být v obecném systému rovněž časově závislý. Řešení rovnice pro základní kvantové systémy je předmětem úvodních kurzů kvantové mechaniky. Kompaktním shrnutím nerelativistické kvantové mechaniky je například učebnice (Cejnar, 2013).

V abstraktním smyslu je časová Schrödingerova rovnice evoluční operátorem na Hilbertově prostoru, který obsahuje (pro systém) relevantní stavové vektory. Příkladem takového prostoru může být prostor kvadraticky integrovatelných funkcí $L^2(\mathbb{R}^d)$. Hamiltonián systému je součtem operátoru kinetické energie \hat{T} a operátoru potenciální energie \hat{V} . Např. v našem fyzikálním systému, který obsahuje jednu částici, jejíž dynamiku chceme popisovat v klidové soustavě ponderomotorického potenciálu, platí

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad \hat{V} = \frac{A}{2} \left(\hat{1} - \cos \frac{2\pi\hat{q}}{\lambda} \right), \quad (3.2)$$

kde \hat{p} a \hat{q} jsou operátory hybnosti a souřadnice ($\hat{1}$ značí operátor identity). V souřadnicové reprezentaci lze operátory vyjádřit skrze jejich působení na vlnovou funkci stavového vektoru, v případě hybnosti a souřadnice pak platí $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dq}$ a $\hat{q} = q$. Časově závislý stavový vektor $|\psi(t)\rangle$ je v souřadnicové reprezentaci vyjádřen pomocí zmiňované komplexní vlnové funkce $\psi(t, q)$, která odpovídá tzv. amplitudě pravděpodobnosti. Kvadrát její absolutní hodnoty $|\psi(t, q)|^2$ poté vyjadřuje pro $\psi(t, q) \in L^2(I)$ (tedy v každém čase kvadraticky integrovatelnou na nějakém uvažovaném intervalu I) hustotu pravděpodobnosti nalezení částice v čase t na souřadnici q .

Časový vývoj v kvantové mechanice představuje unitární transformaci stavového vektoru. Takovou transformaci popisujeme působením evolučního operátoru $\hat{U}(t_2, t_1)$ na stavový vektor

$$|\psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2, t_1) |\psi(t_1)\rangle.$$

Stav $|\psi(t)\rangle$ v rovnici (3.1) tak lze nahradit působením evolučního operátoru $\hat{U}(t) \equiv \hat{U}(t, 0)$ na počáteční stavový vektor $|\psi(0)\rangle$. Rovnice (3.1) tak přejde v diferenciální rovnici pro evoluční operátor a omezíme-li se na časově nezávislé Hamiltoniány, tak lze rovnou psát řešení ve tvaru (přirozeně požadujeme $\hat{U}(0) = \hat{1}$)

$$\hat{U}(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right). \quad (3.3)$$

3.2 Parabolická aproximace potenciálu v jedné prostorové periodě

Nejprve za model studované dynamiky v kvantovém režimu vezmeme jednoduchý případ, ve kterém uvážíme, že je elektron na počátku lokalizován pouze v blízkosti minima jedné prostorové periody potenciálu. Rovněž zanedbáme možnost, že by elektron mohl „přecestovat“ do vedlejší prostorové periody vlivem kvantového tunelování. Těmito předpoklady se omezujeme na situaci, ve které je vhodné použít tzv. parabolickou aproximaci operátoru potenciální energie

$$V(\hat{q}) = \frac{A}{2} \left(\hat{1} - \cos \frac{2\pi\hat{q}}{\lambda} \right) \approx \frac{A\pi^2}{\lambda^2} \hat{q}^2.$$

Pokud označíme

$$\Omega = \frac{\pi}{\lambda} \sqrt{\frac{2A}{m}},$$

tak získáme známý Hamiltonián lineárního harmonického oscilátoru

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2\hat{q}^2. \quad (3.4)$$

Stacionární Schrödingerovu rovnici, která odpovídá vlastnímu problému

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle,$$

najdeme pro Hamiltonián (3.4) vyřešenou v každé úvodní učebnici kvantové mechaniky, příkladem je (Skála a Akademie věd České republiky Praha, 2005). Řešením jsou diskrétní energetické hladiny E_n , kde $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, s příslušnými vlnovými funkcemi $\psi_n(x)$ stacionárních stavů, ve tvaru

$$E_n = \hbar\Omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (3.5)$$

$$\psi_n(q) = \frac{\sqrt[4]{\frac{m\Omega}{\pi\hbar}}}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{m\Omega}{2\hbar}q^2} H_n \left(q \sqrt{\frac{m\Omega}{\hbar}} \right).$$

$H_n(x)$ značí tzv. Hermitův polynom v proměnné x , který lze vyjádřit vztahem

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}).$$

Množina vlnových funkcí $\psi_n(q)$ tvoří úplnou ortonormální bázi Hilbertova prostoru, který pro fyzikální systém lineárního harmonického oscilátoru odpovídá

prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí. Ortonormalitu elementů báze lze vyjádřit buď v abstraktním smyslu (přes stavové vektory) nebo konkrétně skrze skalární součin příslušný danému Hilbertovu prostoru

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(q) \psi_m(q) dq = \delta_{nm},$$

kde $\psi_n^*(q)$ značí komplexní sdružení vlnové funkce. Důležitou vlastností úplné báze je splnění tzv. relace úplnosti

$$\sum_{n=0}^{\infty} |\psi_n\rangle \langle \psi_n| = \hat{1}, \quad (3.6)$$

která je z teoretického a výpočetního hlediska zásadní. Umožňuje nám totiž libovolný stavový vektor $|\phi\rangle$ z našeho Hilbertova prostoru rozložit do báze vektorů $|\psi_n\rangle$ pouhým vložením relace úplnosti

$$|\phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \langle \psi_n | \phi \rangle |\psi_n\rangle \equiv \sum_{n=0}^{\infty} c_n |\psi_n\rangle,$$

kde c_n značí rozvojový koeficient $\langle \psi_n | \phi \rangle$.

Je důležité zmínit, že souřadnicová reprezentace stavového vektoru pomocí vlnové funkce $\psi(q)$ není jedinou možností konkrétního vyjádření stavu systému. Často se používá rovněž hybnostní (také impulsová) reprezentace, ve které je stavový vektor popsán vlnovou funkcí $\Psi(p)$, jejíž interpretace je analogická. Jedná se opět o amplitudu pravděpodobnosti, tentokrát na prostoru hybností, a kvadrát absolutní hodnoty $|\Psi(p)|^2$ vyjadřuje hustotu pravděpodobnosti nalezení částice ve stavu s hybností p . Přechod mezi souřadnicovou a hybnostní reprezentací je dán Fourierovou transformací ve tvaru

$$\Psi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(q) e^{-\frac{i}{\hbar}pq} dq. \quad (3.7)$$

Odvození tohoto závěru se provádí přes vlastní stavy operátorů souřadnice a hybnosti, viz např. (Cejnar, 2013). Vlastní stavy lineárního harmonického oscilátoru, které jsou popsány v (3.5) vlnovými funkcemi $\psi_n(q)$, jsou z pohledu transformace (3.7) speciální. Hermitovy polynomy jsou totiž v určitém smyslu vlastními funkcemi vzhledem k Fourierově transformaci, což jde vyjádřit skrze identitu ((viz Olver a kol., 2010))

$$\frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{4}} H_n\left(\frac{x}{\sqrt{2}}\right) e^{\frac{i}{2}xy} dx = i^n e^{-\frac{y^2}{4}} H_n\left(\frac{y}{\sqrt{2}}\right).$$

Pokud tuto identitu aplikujeme při výpočtu transformace (3.7) vlnových funkcí $\psi_n(q)$, tak dojdeme k hybnostní reprezentaci vlastních stavů ve tvaru

$$\Psi_n(p) = \frac{(-i)^n}{\sqrt{2^n n!}} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi m \hbar \Omega}} e^{-\frac{p^2}{2m\hbar\Omega}} H_n\left(\frac{p}{\sqrt{m\hbar\Omega}}\right). \quad (3.8)$$

Zmíněné poznatky využijeme při zkoumání časového vývoje uvažovaného zjednodušení našeho systému. Z části 3.1 víme, že pokud máme systém v počátečním

stavu $|\phi_0\rangle \equiv |\psi(0)\rangle$, tak platí, že pro časově nezávislý Hamiltonián bude stav v čase t

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\phi_0\rangle.$$

Pokud tedy počáteční stavový vektor (jeho vlnovou funkci) rozložíme do báze vlastních stavů daného Hamiltoniánu, tak lze (implicitně chápeme exponenciálu operátoru jako mocninnou řadu) působení evolučního operátoru přímo nahradit časově závislým fázovým faktorem. Řešením časové Schrödingerovy rovnice tak bude pro uvažovaný Hamiltonián vlnová funkce (v souřadnicové reprezentaci)

$$\psi(t, q) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \psi_n(q), \quad \text{kde} \quad c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(q) \phi_0(q) dq. \quad (3.9)$$

3.3 Znázornění evoluce v jedné periodě a srovnání s klasickým řešením

Stejně jako v sekci 2.4 bychom chtěli vhodným způsobem vizualizovat časový vývoj vlnové funkce, ke které jsme v rámci parabolické aproximace dospěli. Při volbě konkrétních fyzikálních parametrů si vzpomeňme na diskuzi vedenou v části 1.6. Zde bylo zmíněno, že bychom měli pro podélnou koherentní délku elektronového svazku srovnatelnou s rozměry jedné prostorové periody potenciálu pozorovat vývoj blízký klasickému chování. Pro ověření tohoto očekávání bychom rádi při znázornění dynamiky zvolili stejné fyzikální parametry v případě klasické i kvantové simulace. Víme ale, že diskutovaná parabolická aproximace v jedné periodě odpovídá studovanému problému pouze v případě, kdy je vlnová funkce lokalizována do oblasti, která je blízká minimu potenciálu. Zároveň si pak při volbě počátečního stavu musíme uvědomit, že nelze nezávisle volit distribuce v reálném prostoru a v prostoru hybností (narozdíl od počátečních podmínek v klasickém popisu), protože převod mezi distribucemi je vždy dán vztahem (3.7), který souvisí s faktem, že vlnová funkce musí vždy splňovat kvantové relace neurčitosti (viz např. Cejnar, 2013).

Zvolíme proto nejprve vlnovou funkci počátečního stavu $|\phi_0\rangle$ a pro efektivní srovnání modelů vybereme následně počáteční podmínky klasických trajektorií $z_0, \delta v_0$ s rozděleními, která budou odpovídat hustotám pravděpodobnosti $|\phi_0(q = z_0)|^2$ a $|\Phi_0(p = m\delta v_0)|^2$. Pro jednoduchost uvažíme normalizovanou vlnovou funkci v hybnostní reprezentaci ve tvaru gaussovského vlnového balíku

$$\Phi_0(p) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma_p^2}} e^{-\frac{(p-\mu_p)^2}{4\sigma_p^2}}, \quad (3.10)$$

tak aby její kvadrát odpovídal normálnímu rozdělení, které má střední hodnotu μ_p a směrodatnou odchylku σ_p . Provedením inverzní transformace (3.7) získáme souřadnicovou reprezentaci

$$\phi_0(q) = e^{-\frac{i\mu_p}{\hbar}q} \sqrt[4]{\frac{2\sigma_p^2}{\pi\hbar^2}} e^{-\frac{\sigma_p^2}{\hbar^2}q^2}, \quad (3.11)$$

jejíž absolutní hodnota má stejný tvar jako funkce (3.10). Můžeme v ní dokonce

identifikovat parametry¹ vlnového balíku v souřadnicové reprezentaci

$$\mu_q = 0, \quad \sigma_q^2 = \frac{\hbar^2}{4\sigma_p^2}.$$

Abychom v co největší míře reprodukovali parametry asynchronního režimu slabé interakce (evoluce distribuce elektronů v prostoru energií na obrázku 2.7) a současně vyhověli předpokladům kladeným v části 3.2, tak zvolíme střední hodnotu hybnosti μ_p v klidové soustavě takovou, aby odpovídala veličině ΔE_0 , a směrodatnou odchylku σ_q tak, aby lokalizace vlnového balíku byla blízká minimu potenciálu. Ze vztahu (2.15) vyjádříme

$$\mu_p \equiv \langle m\delta v_0 \rangle = mv_g \left(\sqrt{1 + \frac{2\langle \Delta E_0 \rangle}{mv_g^2}} - 1 \right),$$

kam dosadíme hmotnost elektronu, velikost synchronní rychlosti $v_g = 0,2c$ a $\langle \Delta E_0 \rangle = -9 \text{ eV}$. Hodnotu σ_q zvolíme tak, aby šířka normálního rozdělení $|\phi_0(q)|^2$ v polovině maxima byla $\lambda/6$ (stále budeme uvažovat $\lambda = 206 \text{ nm}$). Pro vlnovou funkci $\Phi_0(p)$ s těmito parametry, určíme při amplitudě potenciálu $A = 30 \text{ meV}$ (figuruje v $\Omega(A)$) numericky rozvojové koeficienty

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(p) \Phi_0(p) dp.$$

V rozvoji bylo nakonec použito celkem $N = 50$ vlnových funkcí $\Psi_n(p)$ (poslední koeficient vyšel $|c_{50}| \doteq 5 \cdot 10^{-5}$). Numericky určená vlnová funkce pak bude mít v hybnostní reprezentaci, dle (3.9), tvar

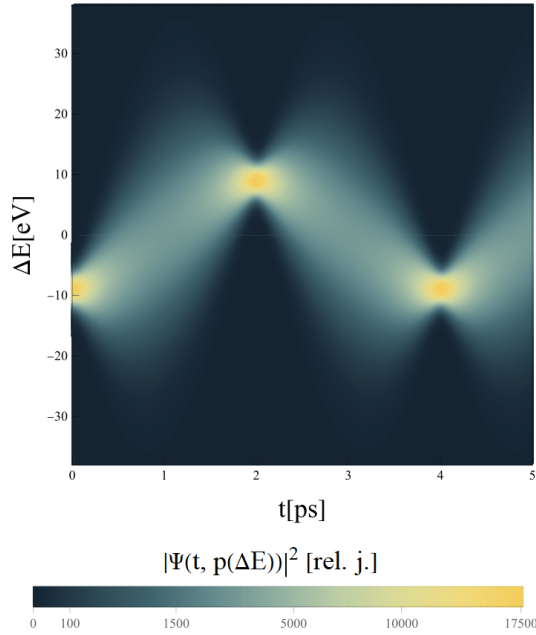
$$\Psi(t, p) = \sum_{n=0}^N c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \Psi_n(p). \quad (3.12)$$

Pro lepší fyzikální představu (v kontextu dřívějších vizualizací) při vykreslení evoluce kvadrátu absolutní hodnoty vlnové funkce (3.12) parametrizujeme prostor hybností pomocí rozdílové energie oproti synchronnímu případu

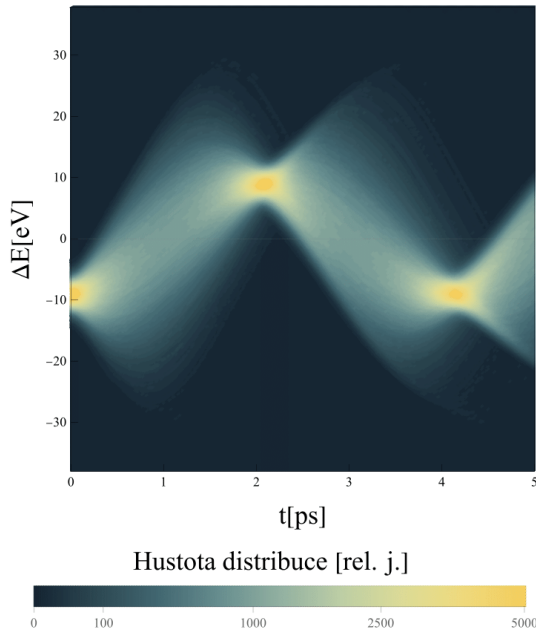
$$p(\Delta E) = mv_g \left(\sqrt{1 + \frac{2\Delta E}{mv_g^2}} - 1 \right).$$

Z důvodu menší relativní ostrosti píků byla při vykreslování obrázků 3.1 a 3.2 použita odmocninná barevná škála (narozdíl od logaritmické u obrázků v části 2.4). Vidíme, že v obou případech opět dochází k periodickému formování píků v prostoru energií, které se následně rozostřují. Perioda oscilací je u vlnové funkce totožná s periodou trajektorie klasického linearizovaného matematického kyvadla. V případě klasického časového vývoje (obrázek 3.2) je perioda delší řádově o 0,05 s, což je opět způsobeno nelineárními trajektoriemi (viz obr. 2.5). Pokud ale srovnáme šířku a rychlost poklesu funkce $|\Psi(t, p(\Delta E))|^2$ ve směru osy ΔE s chováním distribuce elektronů v klasickém modelu, tak vidíme, že si velmi dobře odpovídají. Pokud bychom vykreslili časový vývoj v reálném prostoru, tak bychom opět viděli, že zaostření v prostoru energií opovídá rozostření v reálném prostoru a vice versa. Nicméně v klasickém modelu jsme již k tomuto závěru došli a v kvantovém

popisu je to přímý důsledek transformace (3.7) mezi souřadnicovou a hybnostní reprezentací.



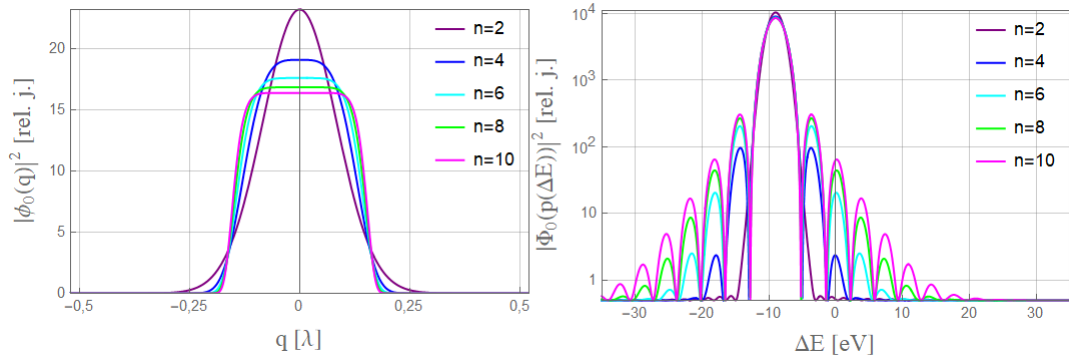
Obrázek 3.1: Časový vývoj kvadrátu vlnové funkce, parametrizované rozdílem energie oproti synchronnímu režimu interakce, v parabolické aproximaci potenciálu. Počáteční vlnová funkce byla ve tvaru gaussovského vlnového balíku se střední hodnotou hybnosti, která odpovídá $\Delta E_0 = -9 \text{ eV}$ a s šířkou v polovině maxima, která byla specifikována v souřadnicové reprezentaci jako $\lambda/6$.



Obrázek 3.2: Klasický časový vývoj hustoty distribuce elektronů v prostoru energií v asynchronním režimu interakce, sloužící k porovnání s obrázkem 3.1. Distribuční funkce počátečních poloh a rychlostí klasických trajektorií odpovídaly kvadrátům normalizovaných počátečních vlnových funkcí $|\phi_0(q = z_0)|^2$ a $|\Phi_0(p = m\delta v_0)|^2$.

Na závěr této části ještě stejným numerickým postupem znázorníme v klidové soustavě evoluci počáteční vlnové funkce elektronu, která odpovídá rovinné vlně s vlnovým vektorem $k_0 = \mu_p/\hbar$, která je lokalizována do blízkosti minima potenciálu pomocí zobecněného normálního rozdělení (viz např. Nadarajah, 2005). Normalizovaná vlnová funkce v souřadnicové reprezentaci $\phi_0^{(n)}(q)$, kde n značí kladný parametr související s tvarem rozdělení, je pak popsána funkcí

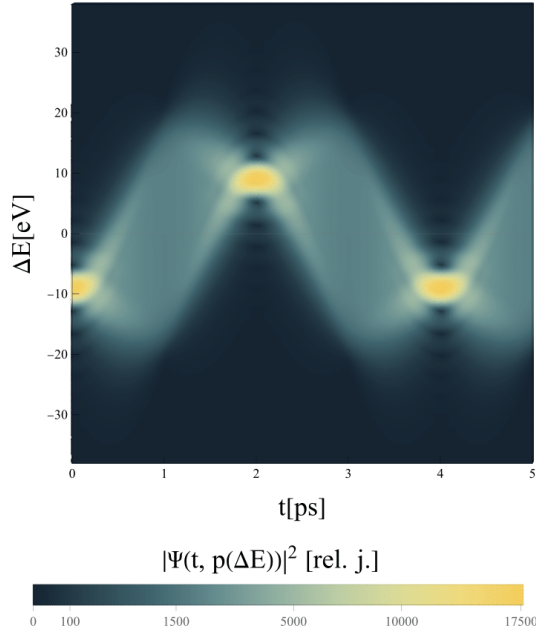
$$\phi_0^{(n)}(q) = e^{ik_0q} \sqrt{\frac{2^{\frac{1}{n}}}{\frac{\lambda}{3} \Gamma\left(\frac{n+1}{n}\right)}} e^{-\left(\frac{6q}{\lambda}\right)^n}. \quad (3.13)$$



Obrázek 3.3: Znázornění kvadrátu absolutní hodnoty počáteční vlnové funkce, která byla použita pro numerické simulace, jejichž výsledky jsou na obrázku 3.4. Na obrázku vlevo máme, pro několik hodnot parametru n , vlnovou funkci v souřadnicové reprezentaci a na obrázku vpravo máme hybnostní reprezentaci.

Z obrázků 3.3 vidíme, že pro vyšší hodnoty parametru n je tvar vlnové funkce v souřadnicové reprezentaci téměř obdelníkový. Současně je ale zřejmé, že když takto přibývá „pravidelnost“ vlnové funkce v reálném prostoru, tak klesá poměr mezi výškami hlavního a postranních píků vlnové funkce v hybnostní reprezentaci. Pro numerické určení časového vývoje, viz obrázek 3.4, byla použita počáteční vlnová funkce $\phi_0^{(n)}(q)$ s parametrem $n = 8$. Na obrázku pozorujeme evoluci, která je svou periodicitou a šířkou na ose ΔE analogická časovému vývoji gaussovského vlnového balíku, viz obrázek 3.1. Viditelným rozdílem oproti dřívější simulaci je ale větší šířka hlavního píku a pozorování postranních píků (již při odmocinné barevné škále). Zároveň si můžeme všimnout, že ihned po rozostření distribuce pozorujeme nejprve formování dvou nízkých píků, které se následně sloučí do tvaru zobecněného normálního rozdělení. Toto chování do jisté míry připomíná klasické evoluce, pozorované v části 2.4.

¹Vztah $\sigma_q\sigma_p = \hbar/2$ odpovídá hraničnímu splnění relací neurčitosti, což je známý výsledek pro vlnový balík ve tvaru normálního rozdělení.



Obrázek 3.4: Časový vývoj kvadrátu vlnové funkce, parametrizované rozdílem energie oproti synchronnímu režimu interakce. Počáteční vlnová funkce měla tvar $\phi_0^{(n)}(q)$ pro $n = 8$. Vlnový vektor k_0 byl volen tak, aby byla hybnostní reprezentace centrována v hodnotě $\Delta E_0 = -9$ eV. Šířka zobecněného normálního rozdělení odpovídala třetině prostorové periody potenciálu.

3.4 Aplikace Blochova teorému na plný periodický potenciál

Podívejme se blíže na fyzikální situaci, ve které je podélná koherentní délka elektronového svazku mnohonásobně delší než prostorová perioda ponderomotorického potenciálu. V tomto režimu interakce nelze použít parabolickou aproximaci, jelikož elektrony v rámci rozptylu „cítí“ plný periodický potenciál. Zároveň očekáváme, že budeme právě v tomto režimu nejvýrazněji pozorovat kvantovou povahu interakce. Opět se omezíme na řešení problému v klidové soustavě potenciálu, ale tentokrát budeme uvažovat periodický Hamiltonián

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{A}{2} \left(\hat{1} - \cos \frac{2\pi\hat{q}}{\lambda} \right). \quad (3.14)$$

Při řešení stacionární Schrödingerovy rovnice využijeme Blochova teorému (viz např. Ashcroft a Mermin, 1976), který pro obecný 3D periodický potenciál $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$, kde \mathbf{R} je tzv. mřížkový vektor, ukazuje², že vlnová funkce vlastního stavu Hamiltoniánu s tímto potenciálem musí být ve tvaru

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{nk}(\mathbf{r}). \quad (3.15)$$

Funkce $u_{nk}(\mathbf{r})$ je prostorově periodická se stejnou periodou jako potenciál V , tedy platí $u_{nk}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{nk}(\mathbf{r})$. Energetické spektrum nekonečného periodického potenciálu je vždy spojitě, má pásovou strukturu (viz Cejnar, 2013) a vlastní funkce

²Jeden z možných důkazů teorému (viz Ashcroft a Mermin, 1976) je založen na komutaci Hamiltoniánu s operátorem posunutí $\hat{T}_{\mathbf{R}}$.

$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ nejsou (ve standardním smyslu) normalizovatelné, jelikož nenáleží do prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí. Vektor \mathbf{k} , který v literatuře po vynásobení \hbar najdeme pod názvy *crystal momentum* či *quasimomentum*, představuje kvantové „číslo“, které specifikuje konkrétní stav v rámci daného energetického pásu. Hodnota vektoru \mathbf{k} ale neurčuje vlastní stav jednoznačně, k tomu je třeba znát ještě příslušnou hodnotu diskrétního indexu n , který je nejčastěji nazýván *band index*.

Vhodným způsobem řešení vlastního problému je využít symetrie kvantového popisu vůči transformaci, kterou lze spojit s unitárním operátorem \hat{U} . Při transformaci stavového vektoru systému $|\phi\rangle$ a operátorů fyzikálních veličin \hat{A} ve tvaru

$$\begin{aligned} |\phi'\rangle &\equiv \hat{U}|\phi\rangle, \\ \hat{A}' &\equiv \hat{U}\hat{A}\hat{U}^\dagger, \end{aligned}$$

kde \hat{U}^\dagger značí hermitovsky sdružený operátor, zůstanou předpovědi a struktura nerelativistické kvantové mechaniky (skalární součiny, vlastní čísla, maticové elementy operátorů, komutátory, atd.) zachovány (viz např. Cejnar, 2013). Pokud zvolíme $\hat{U} = e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}}$ (viz Santoro, 2017), tak dostaneme³

$$\begin{aligned} \psi'_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \\ \hat{H}'_k &= \frac{(\hat{\mathbf{p}} + \hbar\mathbf{k})^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Blochův teorém společně s popsanou transformací budeme chtít aplikovat na řešení našeho 1D stacionárního problému, který je popsán rovnicí

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{A}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi q}{\lambda} \right) \right] \psi(q) = E\psi(q).$$

Naším hlavním cílem je získat předpovědi pro dynamiku elektronu s konkrétním počátečním stavem $|\phi_0\rangle$, který budeme chtít, tak jako v parabolické aproximaci, rozložit do vlastních stavů Hamiltoniánu. Časově závislou vlnovou funkci následně, za znalosti vlastních energií, získáme ve formě řady. Násada v podobě vlnové funkce (3.15) s obecným \mathbf{k} (v 1D pouze jedna složka k) by byla vhodná pro studium pásové struktury (disperzních relací $E_n(k)$), ale bylo by velmi obtížné získat rozumné aproximace vlnových funkcí spojitě-diskrétního spektra, nehledě na náš záměr převést následně problém na nestacionární.

Uvažme, že je vlnová funkce elektronu před interakcí popsána v klidové soustavě rovinnou vlnou $\phi_0(q) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} e^{ik_0q}$, tedy stavem s ostrou hodnotou hybnosti. Abychom nakonec zvládli pomocí numerických výpočtů aproximovat časově závislou vlnovou funkci, tak v ansatzu (3.15) zvolíme $k \equiv k_0$, čímž se v řešení vlastního problému omezíme na diskrétní hladiny

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2} + \frac{A}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi q}{\lambda} \right) \right] \psi_n(q) = E_n \psi_n(q), \quad (3.17)$$

kde $\psi_n(q) = e^{ik_0q} u_n(q)$ a $u_n(q + \lambda) = u_n(q)$. Pokud nyní provedeme transformaci Hamiltoniánu a vlnové funkce analogickou té, která nás pro obecný periodický

³Rovnost $e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} \hat{\mathbf{p}} e^{+i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{r}}} = \hat{\mathbf{p}} + \hbar\mathbf{k}$ je důsledkem tzv. BCH formule (viz Cejnar, 2013) a kanonických komutačních relací $[\hat{\mathbf{r}}_m, \hat{\mathbf{p}}_n] = i\hbar\delta_{mn}$.

potenciál dovedla k (3.16), tak dostaneme rovnici

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dq} + ik_0 \right)^2 + \frac{A}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi q}{\lambda} \right) \right] u_n(q) = E_n u_n(q). \quad (3.18)$$

Značnou výhodou převedení problému na hledání λ -periodických funkcí $u_n(q)$ je fakt, že se nyní pohybujeme na prostoru kvadraticky integrovatelných funkcí $L^2(\langle 0, \lambda \rangle)$, ve kterém máme úplnou ortonormální bázi $\{\phi_j(q)\}_{j=-\infty}^{\infty} = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} e^{\frac{2\pi i j}{\lambda} q}$. Můžeme tedy provést rozvoj

$$u_n(q) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_{nj} \phi_j(q), \quad \text{kde} \quad c_{nj} \equiv \int_0^\lambda \frac{1}{\sqrt{\lambda}} e^{-\frac{2\pi i j}{\lambda} q} u_n(q) dq.$$

Rozvoj dosadíme do rovnice (3.17), kterou následně vynásobíme funkcí $\phi_l^*(q)$ a obě strany vyintegrujeme na intervalu $\langle 0, \lambda \rangle$. Výsledkem je, díky ortonormalitě funkcí $\phi_j(q)$, rovnice

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} H'_{lj} c_{nj} = E_n c_{nl}, \quad (3.19)$$

kde H'_{lj} značí maticový element transformovaného Hamiltoniánu v bázi funkcí $\phi_j(q)$, tedy

$$H'_{lj} \equiv \langle \phi_l | \hat{H}' | \phi_j \rangle = \int_0^\lambda \phi_l^*(q) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d}{dq} + ik_0 \right)^2 + \frac{A}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi q}{\lambda} \right) \right] \phi_j(q) dq.$$

Získáváme tedy jasný postup pro numerické řešení, a tím je sestavení matice H'_{lj} a její následná diagonalizace, čímž získáme vlastní energie E_n a sadu vlastních vektorů $\{c_{nj}\}_{j=-\infty}^{\infty}$, které obsahují rozvojové koeficienty, pomocí kterých získáme funkce $u_n(q)$, tedy po vynásobení faktorem $e^{ik_0 q}$ hledané vlastní stavy $\psi_n(q)$.

Očividně nikdy nenajdeme funkce $u_n(q)$ zcela přesně, jelikož bychom museli sestavit a diagonalizovat nekonečně rozměrnou matici H'_{lj} . Tento problém ale ještě nechme chvíli stranou a uvažme, že máme k dispozici koeficienty c_{nj} a vlastní energie E_n . Uvažovaná počáteční vlnová funkce $\phi_0(q) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} e^{ik_0 q}$ má v přetransformované soustavě jednoduchý tvar konstanty $\phi'_0(q) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}$. Její rozklad do funkcí $u_n(q)$ tak vede na

$$\phi'_0(q) = \sum_{n=0}^{\infty} \kappa_n u_n(q) \quad \text{a} \quad \kappa_n \equiv \int_0^\lambda \frac{1}{\sqrt{\lambda}} u_n^*(q) dq = \sum_{j=-\infty}^{\infty} c_{nj}^* \int_0^\lambda \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{2\pi i j}{\lambda} q} dq = c_{n0}^*,$$

jelikož zřejmě poslední tvar integrálu vede na nenulový výsledek pouze v případě $j = 0$. Dle vztahu (3.9), ve kterém nyní hrají $u_n(q)$ roli vlastních funkcí s energiemi E_n , tak lze časově závislou vlnovou funkci v transformované soustavě zapsat jako

$$\psi'(t, q) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n0}^* e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} u_n(q) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n0}^* e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{c_{nj}}{\sqrt{\lambda}} e^{\frac{2\pi i j}{\lambda} q}.$$

V původní soustavě, která odpovídá klidové soustavě ponderomotorického potenciálu, tak výsledné řešení zapíšeme ve tvaru

$$\psi(t, q) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{c_{n0}^* c_{nj}}{\sqrt{\lambda}} \exp \left(ik_0 q + \frac{2\pi i j}{\lambda} q - \frac{i}{\hbar} E_n t \right). \quad (3.20)$$

Vlnovou funkci v prostoru hybností lze vyjádřit jako

$$\Psi(t, p) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j=-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\lambda}} c_{n0}^* c_{nj} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \delta \left[p - \hbar \left(k_0 + \frac{2\pi j}{\lambda} \right) \right], \quad (3.21)$$

kde jsme při výpočtu transformace (3.7) aplikovali distribuční identitu (viz Cejnar, 2013)

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\frac{p'-p}{\hbar} q} dq = 2\pi\hbar \delta(p' - p).$$

3.5 Interpretace a znázornění evoluce ostré hladiny hybnosti

Z tvaru (3.21) výsledné vlnové funkce v hybnostní reprezentaci vidíme, že jsme pro počáteční stav $\Phi_0(p) \propto \delta(p - \hbar k_0)$ získali superpozici diskrétních hladin, které si jsou vzdáleny o celistvý násobek $\Delta p = 2\pi\hbar/\lambda$. Z části 2.3 víme, že $\lambda = 2\pi c/(\omega_1 + \omega_2)$, a tedy $\Delta p = \hbar(\omega_1 + \omega_2)/c$, což odpovídá změně hybnosti elektronu, který absorboval foton od jedné z vln a vlivem stimulovaného Comptonova rozplytu emitoval foton do druhé, opačným směrem se šířící, vlny. Časově závislá míra obsazení hladiny s indexem j je pak (viz (3.21)) dána výrazem

$$\Sigma_j(t) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} c_{n0}^* c_{nj} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}.$$

Abychom vytvořili obrázek, který bude znázorňovat časový vývoj obsazení jednotlivých hladin, tak budeme chtít nahradit divergentní δ funkce. Využijeme distribuční limitu

$$\lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{|a|\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{x}{a}\right)^2} = \delta(x).$$

Rovnici (3.19), jejímž řešením jsou koeficienty c_{nj} a vlastní energie E_n , je třeba při numerickém řešení vhodně omezit limitní hodnotou K na

$$\sum_{j=-K}^K H'_{lj} c_{nj} = E_n c_{nl},$$

tak aby byla dosažena dostatečně dobrá konvergence koeficientů c_{nj} . Řešení jsme opět konstruovali v prostředí *Wolfram Mathematica*, kde hlavní numerickou nestabilitu způsoboval výpočet maticových elementů H'_{lj} pro rychle oscilující bázové funkce ϕ_j s vysokým j . Nakonec bylo ale pro $K = 50$ nalezeno dostatečně stabilní řešení, jehož přesnost je charakterizovatelná pomocí hodnoty

$$\max_n \min_j |c_{nj}| \approx 2 \cdot 10^{-16}.$$

Vizualizaci řešení tak provedeme, dle výše popsaného, pomocí vlnové funkce

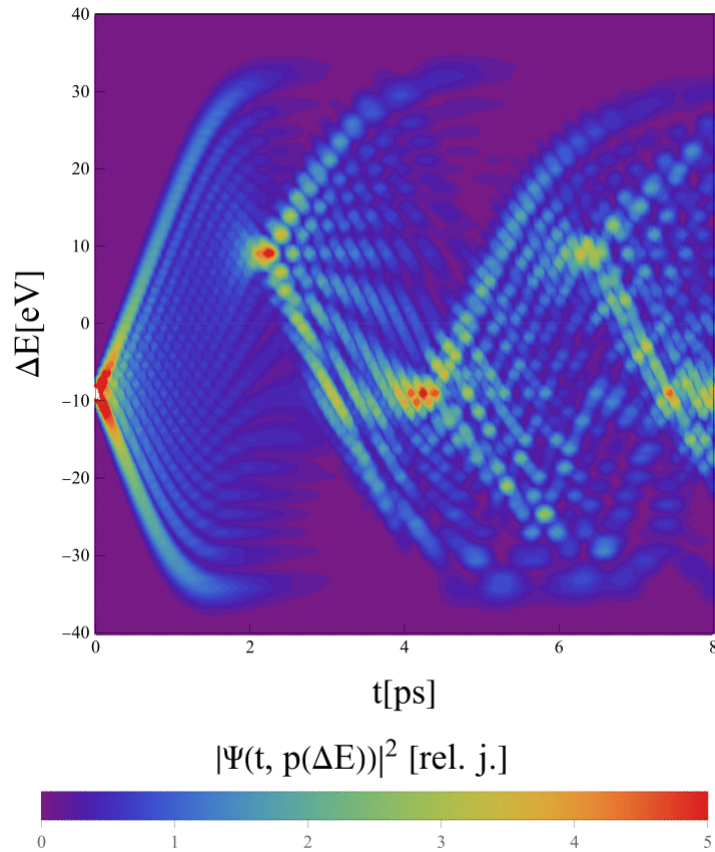
$$\Psi(t, p) \approx \sqrt{\frac{2\hbar}{\lambda}} \sum_{j=-K}^K \frac{\Sigma_j^{(K)}(t)}{|a|} \exp \left[- \left(\frac{p - \hbar \left(k_0 + \frac{2\pi j}{\lambda} \right)}{a} \right)^2 \right], \quad (3.22)$$

kde použijeme $a \doteq 5 \cdot 10^{-6}$ a označujeme $\Sigma_j^{(K)}(t) \equiv \sum_{n=0}^{2K} c_{n0}^* c_{nj} \exp(-\frac{i}{\hbar} E_n t)$. Abychom mohli výsledek srovnat s předchozími obrázky, tak zvolíme opět stejné fyzikální parametry, tedy $\lambda = 206$ nm, do vztahu

$$p_0 \equiv \hbar k_0 = mv_g \left(\sqrt{1 + \frac{2\Delta E_0}{mv_g^2}} - 1 \right)$$

dosadíme $\Delta E_0 = -9$ eV a při výpočtu maticových elementů jsme vzali velikost amplitudy $A = 30$ meV.

Na obrázku 3.5 vidíme, že i když se pohybujeme mimo parabolickou aproximaci, tak pozorujeme periodické fokusování vlnové funkce (v tomto případě obsazení diskretních hladin) mimo počáteční hodnotu energie. Srovnáním s obrázkem 2.7 zjistíme, že si pozice hlavních píků odpovídají v čase i v konkrétních hodnotách ΔE . Viditelným rozdílem oproti klasickému obrázku (samozřejmě vyjma celkové „diskrétní“ povahy) je ale rychlejší rozplývání hlavních píků, zejména když si uvědomíme, že obrázek 2.7 byl vykreslen na logaritmické barevné škále. Opakování postupu pro větší počet hladin hybnosti z požadovaného rozdělení by nám umožnilo určit vývoj složitějších počáteční vlnových funkcí.



Obrázek 3.5: Časový vývoj kvadrátu vlnové funkce, parametrizované rozdílem energie oproti synchronnímu případu. Znázorněná evoluce popisuje interakci počáteční vlnové funkce ve tvaru vlastního stavu hybnosti, který odpovídá energii $\Delta E_0 = -9$ eV, s nekonečným periodickým potenciálem. Bílá oblast v blízkosti $(t, \Delta E) \rightarrow (0, -9$ eV) je způsobena limitováním vykreslovaného intervalu funkčních hodnot.

Závěr

V rámci úvodní kapitoly jsme shrnuli některé důležité aspekty interakce nabitých částic s ponderomotorickým potenciálem. Krátce jsme se rovněž zabývali aplikačními možnostmi nepružného režimu této interakce, které motivují současné experimenty. V části 1.3 jsme argumentovali, proč je za určitého experimentálního uspořádání možné problematiku studovat pouze v jedné prostorové dimenzi. Pro toto uspořádání jsme v sekci 1.5 odvodili konkrétní harmonický tvar ponderomotorického potenciálu, který pocítuje nabitá částice pohybující se rychlostí synchronizovanou s grupovou rychlostí optické záznějové vlny tvořené dvěma koincidujícími laserovými pulzy. V práci se omezujeme na plně nerelativistický popis, a tak byl během tohoto odvození při přechodu do klidové soustavy záznějové vlny γ -faktor položen rovný jedné. Zároveň byla zanedbána konečnost interakčního potenciálu a časová modulace obálky laserových pulzů. Dopad těchto aproximací na finální předpovědi časového vývoje by bylo možné analyzovat pomocí plně numerických simulací.

Studium dynamiky nás v klasickém přístupu dovedlo k řešení pohybové rovnice analogické problému matematického kyvadla. Tuto rovnici jsme řešili v její nelineární podobě pro obecné počáteční podmínky trajektorie elektronu. Řešení jsme rozdělili na případ nevázaných trajektorií, které přísluší elektronům s dostatečnou kinetickou energií pro opuštění prostorové periody potenciálu, a vázaných trajektorií setrvávajících v jedné periodě. Využitím Jacobiho eliptických funkcí, jež je možné zavést pomocí analytické inverze eliptického integrálu prvního druhu, jsme došli ke kompletnímu vyjádření trajektorie v obou těchto případech. Analytické řešení nám umožnilo provést vizualizaci evoluce distribuce elektronů v reálném prostoru a prostoru energií pro řádově 10^5 elektronů s využitím omezené výpočetní kapacity. Zajímavá situace nastává v asynchronním režimu interakce, kdy má elektron na počátku rychlost odlišnou od grupové rychlosti záznějové vlny. V tomto režimu pozorujeme ostré fokusování distribuce elektronů v prostoru energií mimo počáteční pík energetického rozdělení. Rozdíl rychlostí bylo ale třeba uvažovat malý, aby bylo možné s dostatečnou přesností použít odvozený tvar potenciálu.

V kvantovém modelu jsme nejprve nahradili reálný tvar potenciálu parabolou v blízkosti minima, čímž jsme studovanou interakci převedli na systém lineárního harmonického oscilátoru. S využitím známých vlastních stavů ve tvaru Hermitových polynomů jsme se zabývali časovým vývojem vlnové funkce ve tvaru gaussovského vlnového balíku, abychom názorně porovnali předpovědi s klasickým modelem. Evoluci vlnové funkce v parabolické aproximaci potenciálu jsme následně ilustrovali ještě na počáteční vlnové funkci ve tvaru rovinné vlny modulované odmocninou z distribuční funkce zobecněného normálního rozdělení. Využitím Blochova teorému a vhodné unitární transformace plného harmonického Hamiltoniánu se nám podařilo po analytických úpravách znázornit evoluci počáteční vlnové funkce ve tvaru rovinné vlny, tedy vlastního stavu operátoru hybnosti. Časový vývoj je charakterizován obsazením diskrétních energetických hladin, které jsou od sebe v laboratorní soustavě vzdáleny o energetický rozdíl odpovídající rozdílu mezi energií absorbovaného a emitovaného fotonu v rámci stimulovaného Comptonova rozptylu.

Výsledky prezentovaných výpočtů přinášejí zajímavou možnost selektivního urychlení či zpomalení významné části populace monoenergetických elektronů prostřednictvím interakce se světlem. Tato manipulace není možná v synchronním režimu, kdy je počáteční rychlost elektronů a záznějové vlny stejná a změna rychlosti elektronů během interakce zanedbatelná. Provedená teoretická analýza a numerické výpočty poslouží jako základ pro numerické simulace, v nichž bude uvažováno realistické časové a prostorové rozložení elektronů a také skutečný tvar laserových pulzů generujících ponderomotorický potenciál. Výsledky budou rovněž využity k odhadu parametrů vhodných pro experimentální demonstraci a praktické aplikace asynchronní interakce mezi elektrony a světelnou vlnou.

Seznam použité literatury

- ASHCROFT, N. a MERMIN, N. D. (1976). Electron levels in a periodic potential: General properties. *Solid State Physics, ND Mermin, Ed. (New York, NY, 1976) pp*, pages 133–150.
- BARWICK, B., FLANNIGAN, D. J. a ZEWEIL, A. H. (2009). Photon-induced near-field electron microscopy. *Nature*, **462**(7275), 902–906.
- BAUER, D. (2006). Theory of intense laser-matter interaction. *Max-Planck-Institute Kernphysik, Heidelberg, Germany*.
- BELÉNDEZ, A., PASCUAL, C., MÉNDEZ, D., BELÉNDEZ, T. a NEIPP, C. (2007). Exact solution for the nonlinear pendulum. *Revista brasileira de ensino de física*, **29**, 645–648.
- BOCHOVE, E. J. (1996). Unified derivation of classical radiation forces. *American Journal of Physics*, **64**(11), 1419–1422.
- BREUER, J. a HOMMELHOFF, P. (2013). Laser-based acceleration of nonrelativistic electrons at a dielectric structure. *Physical review letters*, **111**(13), 134803.
- CEJNAR, P. (2013). *A Condensed Course of Quantum Mechanics*. Charles University in Prague, Karolinum Press.
- DE ABAJO, F. G. (2010). Optical excitations in electron microscopy. *Reviews of modern physics*, **82**(1), 209.
- FEIST, A., BACH, N., DA SILVA, N. R., DANZ, T., MÖLLER, M., PRIEBE, K. E., DOMRÖSE, T., GATZMANN, J. G., ROST, S., SCHAUSS, J. A KOL. (2017). Ultrafast transmission electron microscopy using a laser-driven field emitter: Femtosecond resolution with a high coherence electron beam. *Ultra-microscopy*, **176**, 63–73.
- FREIMUND, D. L., AFLATOONI, K. a BATELAAN, H. (2001). Observation of the kapitza–dirac effect. *Nature*, **413**(6852), 142–143.
- HILBERT, S. A., UITERWAAL, C., BARWICK, B., BATELAAN, H. a ZEWEIL, A. H. (2009). Temporal lenses for attosecond and femtosecond electron pulses. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **106**(26), 10558–10563.
- KAPITZA, P. a DIRAC, P. (1933). The reflection of electrons from standing light waves. In *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, volume 29, pages 297–300. Cambridge University Press.
- KOZÁK, M., ECKSTEIN, T., SCHÖNENBERGER, N. a HOMMELHOFF, P. (2018a). Inelastic ponderomotive scattering of electrons at a high-intensity optical travelling wave in vacuum. *Nature Physics*, **14**(2), 121–125.
- KOZÁK, M., SCHÖNENBERGER, N. a HOMMELHOFF, P. (2018b). Ponderomotive generation and detection of attosecond free-electron pulse trains. *Physical review letters*, **120**(10), 103203.

- MAIMAN, T. H. A KOL. (1960). Stimulated optical radiation in ruby.
- NADARAJAH, S. (2005). A generalized normal distribution. *Journal of Applied statistics*, **32**(7), 685–694.
- OLVER, F. W., LOZIER, D. W., BOISVERT, R. F. a CLARK, C. W. (2010). *NIST handbook of mathematical functions hardback and CD-ROM*. Cambridge university press.
- SANTORO, G. E. (2017). Introduction to floquet.
- SKÁLA, L. a AKADEMIE VĚD ČESKÉ REPUBLIKY PRAHA, Č. (2005). *Úvod do kvantové mechaniky*. Academia.