

fizikai szemle



2017/10

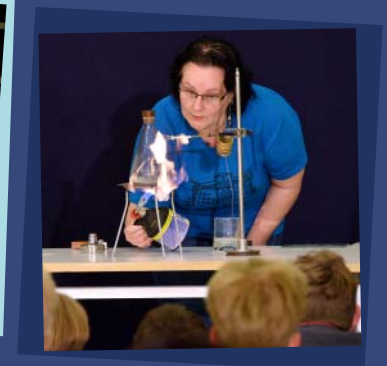
Az Ericsson Magyarország Kft.-nek köszönhetően a budai Science Parkban már hatodszor láthattuk Öveges József tanár úr mostani utódait, „sztár” fizikatanárokat. Az idei estre is tíz kiváló tanárkollégát hívtunk vendégül az ország különböző részéből.

A rendezvény nagyon sikeres, a közönség minden évben sok új élménnyel, információval feltöltődve távozik a teltházassal, ahol az est folyamán legalább 800-1000 fő fordul meg. A megkérdezettek mindannyian pozitívan nyilatkoztak a látottakról, és egyre többen várják, hogy jövőre visszatérhessenek, és újra láthassák Öveges tanár úr utódait.

Ez úton is köszönjük az Ericsson Magyarország Kft.-nek, hogy helyt adott a rendezvény lebonyolításához, és minden technikai feltételt, marketinget is biztosított a siker érdekében. Reméljük, hogy az együttműködést továbbra is folytathatjuk.

Bővebben az egyik következő számban olvashatnak az estről.

Jarosievitz Beáta, Sükösd Csaba
szervezők





Osvay Károly 1990-ben szerzett fizikus diplomát a József Attila Tudományegyetem fizikus szakán, Szegeden. Lézerfizikai kutatási eredményeiért 1995-ben megkapta a fizikai tudományok kandidátusa MTA fokozatot. 2011-ben habilitált a Szegedi Tudományegyetemen. 2011–13. az SZTE TTK Optikai és Kvantumelektronikai Tanszék megbízott vezetője. 8 évet töltött vezető európai kutatóintézetekben. 1998-ban alapította és azóta is vezeti a TeWaTi lézerlaboratóriumot és kutatócsoportot. Több tucat hazai és nemzetközi pályázat témavezetője. Fő kutatási területe az ultrarövid lézerimpulzusok előállítása és alkalmazása. Referált folyóiratokban 88 publikációja jelent meg, ezekre közel 1000 hivatkozást kapott, h-indexe 20. Nyolc szabadalma van. 2007 óta vesz részt az ELI program létrehozásában. Jelenleg az ELI-HU Nkft. kutatási-technológiai igazgatója.

KEDVES OLVASÓ!

Bizonyára ismeri a mondást, „ha a hegy nem megy Mohamedhez, akkor Mohamed megy a hegyhez”. A mi esetünkben éppen fordítva történt: Szeged nem ment az Alpokba, így az ALPS-ot (sic!) hoztuk Szegedre.

Az Extreme Light Infrastructure projektet Gerard Mourou és társai még 2005-ben kezdeményezték, hogy létrehozzák a világ első ultrarövid és nagy csúcsintenzitású lézereken alapuló kutatóintézetét. Az ESFRI Roadmap-re felkerült javaslatot 2007–11 között egy nemzetközi előkészítő konzorcium vitte közelebb a megvalósításhoz, amelyben a magyar részvételt Czitrovsky Aladár (Wigner FK) és ezen sorok írója (akkor még SZTE) koordinálta. Az előkészítők 2009. októberi döntése alapján a kutatóintézetet nem egyetlen, hanem három – az EU Strukturális Felzárkóztatási Alapjaiból 85%-ban finanszírozott – helyszínen hozzák létre, egymást kiegészítő kutatási profilokkal. A Prága melletti Dolni Brezanyban megvalósuló intézet (ELI-Beamlines), valamint a Bukaresttel határos Măgureleében megépülő intézmény (ELI-Nuclear Photonics) mellett az Attosecond Light Pulse Source (Attoszekundumos Fényimpulzus Forrás – ELI-ALPS) Szegedre került. Az ELI-ALPS megvalósítását az ELI-Hu Nonprofit Kft.-ra bízta, amely az NKFIH minősítése alapján akkreditált kutatóintézetként működik.

Az ELI-ALPS fő kutatási berendezései olyan lézerrendszereken alapulnak, amelyek új minőségi szintet képviselve nem csak különleges paraméterkombinációval (nagy fluxus, extrém sávszélesség) rendelkező impulzusokat állítanak elő, hanem 2%-on belüli stabilitással, megbízhatóan működnek, akár a nap 24 óráján át. A 650–1300 nm, illetve a 3 μ m hullámhosszú lézerimpulzusok időbeli hossza mindössze néhány ciklusnyi (6–17 fs, illetve < 40 fs), így az elektromágneses csúcsteljesítmény a PW tartományt is eléri. A lézerek ismétlési frekvenciája 10 Hz – 100 kHz közé, míg átlagos teljesítményük a 10–500 W-os tartományba esik. Ezen lézerek teszik lehetővé a kivételes jellemzőjű másodlagos források – a THz-es sugárzástól a röntgensugárzásig terjedő fényforrások és a részecskeforrások – működését.

Az ELI-ALPS elsődleges küldetése az impulzusenergia, az ismétlési frekvencia és a fotonenergia tekintetében a lehető legjobb, az extrém ultraibolya (XUV) tartományba eső attoszekundumos impulzusok előállítása, amelyekkel a hazai és nemzetközi tudományos közösség világszínvonalú alap- és alkalmazott kutatásokat végezhet majd.

A 2017. május 23-án ünnepélyesen megnyitott épületben jelenleg az első két berendezés – a középinfraörös (MIR) lézerrendszer és a THz forrás – telepítése zajlik (lásd címlap). Októberben érkezik a harmadik, a nagy ismétlési frekvenciájú lézerrendszer (HR). Mindhárom berendezésen a hazai és külföldi kutatók 2018 februárjától már méréseket végezhetnek. Az attoszekundumos impulzusokat előállító nyalábvonal várhatóan 2018 második felétől üzemel majd. További lézerek és másodlagos források, mérőállomások telepítése a következő három év feladata, és fokozatosan válnak elérhetővé.

Külön örülünk, hogy a hazai kutatók, kutatói közösségek előtt a korábbi műhelymegbeszélések és konferenciák után ezzel a tematikus számmal is bemutatkozhatunk. Remélem, hogy a nemzetközi fenntartású ELI-ALPS Kutatóintézetben a hazai kollégák is évről-évre nagyobb számban végeznek majd kísérleteket.


Osvay Károly
kutatási-technológiai igazgató

Az Eötvös Loránd Fizikai Társulat havonta megjelenő folyóirata.

Támogatók: a Magyar Tudományos Akadémia Fizikai Tudományok Osztálya, az Emberi Erőforrások Minisztériuma, a Magyar Biofizikai Társaság, a Magyar Nukleáris Társaság és a Magyar Fizikushallgatók Egyesülete

Főszerkesztő:
Lendvai János

Szerkesztőbizottság:
Bencze Gyula, Czitrovszky Aladár, Faigel Gyula, Füstöss László, Gyulai József, Horváth Dezső, Horváth Gábor, Iglói Ferenc, Kiss Ádám, Németh Judit, Ormos Pál, Papp Katalin, Simon Péter, Sükösd Csaba, Szabados László, Szabó Gábor, Szatmáry Zoltán, Trócsányi Zoltán, Ujvári Sándor

Műszaki szerkesztő:
Kármán Tamás

A folyóirat e-mailcíme:
szerkesztok@fizikaiszemle.hu

A lapba szánt írásokat erre a címre kérjük.

A beküldött tudományos, ismeretterjesztő és fizikatanítási cikkek a Szerkesztőbizottság, illetve az általa felkért, a témában elismert szakértő jóváhagyó véleménye után jelenhetnek meg.

A folyóirat honlapja:
http://www.fizikaiszemle.hu



A címlapon:

A közép-infravörös (MIR) lézert Kiss Bálint és munkatársai telepítik az ELI-ALPS Kutatóközpontban.

Köszöntő (Osvay Károly)	329
Major Balázs, Kőrös Pál Csaba, Varjú Katalin: Attoszekundumos impulzusokeltetés makroszkopikus optimalizációja <i>A fázisillesztési probléma rövid ismertetése mellett a cikk az ELI-ALPS két készülő nyálábvonalát is bemutatja</i>	331
Csebi András, Halász Gábor, Vibók Ágnes: Kvantumkontroll fázismodulált lézerimpulzusokkal <i>A lézerimpulzus frekvenciájának időbeli változtatása új lehetőség a kémiai dinamikai folyamatok tanulmányozásában</i>	335
Tőkési Károly: Kollektív gerjesztések valós idejű megfigyelése fotoemisszió során <i>Egy új pumpaszonda-kísérlet, az időfelbontásos fotoemisszió alkalmas a fémek plazmangerjesztéseinek valós idejű megfigyelésére</i>	341
Földi Péter: A magas felharmonikusok keltésének kvantumoptikai leírása <i>Az intenzív lézerekben megfigyelhető magasfelharmonikus-keltés leírása a módusok terének kvantált kezelésével</i>	345
Groma Géza: Útban az ELI felé: femtoszekundum időfelbontású fluoreszcenciaspektroszkópia egy koenzim-molekulán <i>Az időfelbontásos fluoreszcenciaspektroszkópia alkalmas finom molekulaszervezeti változások nyomonkövetésére</i>	349
Horváth Zoltán György: A magyar kézműves holográfia hőskora – 2. rész: látványholográfia <i>Az 50 éves múltira visszatekintő magyarországi holográfia kezdeti lépéseinek bemutatása</i>	355

A FIZIKA TANÍTÁSA

Tichy Géza, Vankó Péter, Vigh Máté: Gondolatok az Eötvös-verseny 1. példájáról – 1. rész: stacionárius eset	360
---	-----

HÍREK – ESEMÉNYEK

Fizikai kísérletek – nem csak tudósoknak (Jarosievitz Beáta, Sükösd Csaba)	329
Az ELI-ALPS első tanártovábbképzése	354
Zawadowski Alfréd, 1936–2017 (Mibály György, Kertész János, Zaránd Gergely)	363

K. Osvay: Welcome

B. Major, P. Cs. Kőrös, K. Varjú: Macroscopic optimization of the generation of attosecond pulses

A. Csebi, G. Halász, Á. Vibók: Quantum control with phase modulated laser pulses

K. Tőkési: Real time observation of collective excitations during photoemission

P. Földi: Quantum optical description of high harmonics generation

G. Groma: Underway to ELI: femtosecond fluorescence spectroscopy on a coenzyme molecule

Z. G. Horváth: Heroic age of Hungarian handicraft holography – Part II.: Spectacle holography

TEACHING PHYSICS

G. Tichy, P. Vankó, M. Vigh: Further considerations on the first problem of the Eötvös Physics Competition – Part I.: Stationary case

EVENTS

Szerkesztőség: 1092 Budapest, Ráday utca 18. földszint III., Eötvös Loránd Fizikai Társulat. Telefon/fax: (1) 201-8682

A Társulat Internet honlapja <http://www.elft.hu>, e-postacímje: elft@elft.hu

Kiadja az Eötvös Loránd Fizikai Társulat, felelős kiadó Groma István főtisztár, felelős szerkesztő Lendvai János főszerkesztő.

Kéziratokat nem örzünk meg és nem küldünk vissza. A szerzőknek tiszteletpéldányt küldünk.

Nyomdai előkészítés: Kármán Stúdió, nyomdai munkálatok: OOK-PRESS Kft., felelős vezető: Szatmáry Attila ügyvezető igazgató.

Terjeszti az Eötvös Loránd Fizikai Társulat, előfizethető a Társulatnál vagy postautalványon a 10200830-32310274-00000000 számú egyzámlán.

Megjelenik havonta (nyáron duplaszámmal), egyes szám ára: 900.- Ft (duplaszáma 1800.- Ft) + postaköltség.

HU ISSN 0015–3257 (nyomtatott) és HU ISSN 1588–0540 (online)



ATTOSZEKUNDUMOS IMPULZUSKELTÉS MAKROSZKOPIKUS OPTIMALIZÁCIÓJA

Major Balázs, Kőrös Pál Csaba, Varjú Katalin

ELI-ALPS, ELI-HU Nonprofit Kft., Szeged

Szegedi Tudományegyetem Optikai és Kvantumelektronikai Tanszék

A lézerek folyamatos fejlődésének köszönhetően újabb és újabb technológiai vívmányok állnak rendelkezésünkre, amelyek közül számos igen gyorsan megjelenik mindennapi életünkben is. Az internet kapcsán gondoljunk az optikai szálakon történő adattovábbításra, vagy okostelefonjaink burkolata mögött rejtőzködő mikroprocesszorokra. Emellett a lézerek segítségével a fizika, a kémia, az anyagtudomány vagy éppen a biológia eddig rejtett szegmenseibe kaphatunk betekintést. Ezen új tudományterületek közé tartozik a 2000-es évek környékén született attoszekundumos vagy attofizika, amely azóta is robbanásszerűen fejlődik, és vélhetően csak sok-sok év múlva ér deklópontjára. Nem meglepő tehát, hogy 2005-ben az első Kutatási Infrastruktúrák Európai Stratégiai Fórumának (European Strategy Forum on Research Infrastructures,

Az ELI-ALPS projekt (GINOP-2.3.6-15-2015-00001) az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósul meg.



Major Balázs, PhD, az ELI-ALPS kutatóintézet tudományos munkatársa, a Szegedi Tudományegyetem Optikai és Kvantumelektronikai Tanszékének tudományos segédmunkatársa. PhD fokozatát 2017-ben szerezte, dolgozatának címe *Phase and polarization changes of pulsed Gaussian beams during focusing and propagation*. Jelenlegi kutatási területe a magasharmonikus-keltés folyamatának vizsgálatára és alkalmazásaira terjed ki.



Kőrös Pál Csaba kutatómérnök a Bosch Magyarországnál. A Szegedi Tudományegyetemen szerzett fizikus diplomát 2017-ben, kétszeres köztársasági ösztöndíjas. Diplomamunkáját a magasharmonikus-keltés optimalizációjából írta Varjú Katalin és Veisz László témavezetésével.



Varjú Katalin, PhD, a Szegedi Tudományegyetem Optikai és Kvantumelektronikai Tanszékének docense, az ELI-ALPS lézeres kutatóintézet osztályvezetője. Kutatási területe attoszekundumos impulzusok keltése és alkalmazásai.

ESFRI *Útitervébe* bekerült egy lézeres kutatóközpont is, az *Extreme Light Infrastructure* (ELI). Az azóta a megvalósítás utolsó fázisába érkezett, három helyszínen (Csehország, Magyarország, Románia) létrehozott intézet célja, hogy számos, lézerekhez kötődő tudományterület világvezető kutatási helyszínéül szolgáljon [1]. A prágai és mágurelei intézettől a szegedi ELI-t az különbözteti meg, hogy itt a kitűzött cél az attofizika úttörőjévé válni, ahogy ezt az ELI-ALPS (Extreme Light Infrastructure – Attosecond Light Pulse Source, azaz „ELI Attoszekundumos Fényimpulzus Forrás”) elnevezés is mutatja [1].

Farkas Győzőnek és kollégáinak köszönhetően elméletben már az 1990-es évek elején ismert volt, hogy attoszekundumos impulzusok miként állíthatók elő a lézerekkel keltett távoli ultraibolya-, valamint a még magasabb frekvenciájú XUV- (eXtreme UltraViolet) vagy röntgensugárzás segítségével [2]. Az attoszekundumos impulzusok keltésének kísérleti megvalósítására, az attoszekundumos impulzussorozat, illetve izolált attoszekundumos impulzus időbeli karakterizálására azonban ezután még majd egy évtizedet kellett várni, amely eredmény segítségével megszülethetett az attofizika [3]. Ez a tudományterület olyan új kérdéseket vet fel, amelyeket – közvetetten – a nagy intenzitású lézerek segítségével válaszolhatunk meg. Az attoszekundumos impulzus előállítása, detektálása és analízise azóta már a világ számos egyetemén és kutatóintézetében rutinfeladattá vált [4]. Az azonban, hogy a napjainkban elérhető – például az ELI-ALPS kutatóintézetben is használatos – nagy teljesítményű lézerimpulzusokkal hogyan lehet hatékonyan szintén nagy teljesítményű attoszekundumos impulzusokat előállítani, már kevésbé triviális kérdés. Az egyatom-válasz – vagyis egy nemesgáz atom és a nagy csúcsteljesítményű lézerimpulzus kölcsönhatásának eredményeképpen keletkező magasharmonikus sugárzás, ami koherens, attoszekundumos impulzusok formájában jelenik meg – jól ismert folyamat [3, 4]. Nem szabad elfelejteni: ahhoz, hogy számottevő mennyiségű XUV-sugárzást kelthessünk a kísérlet során, nagyszámú atomra kell rállóni. Nagy energiájú, újabb távlatokat megnyitó attoszekundumos fényimpulzus-forrás megalkotásához kísérleti elrendezésünket úgy kell beállítani, hogy az egyes atomok által kibocsátott sugárzás egymással konstruktív interferenciába lépjen, és ne kioltsa egymást. A nemlineáris optikában – amelynek a magasharmonikus-keltés egy kitűnő példája – ezt hívjuk a *fázisillesztés* problémájának.

A hatékony XUV-impulzus forrás létrehozása érdekében az ELI-ALPS kutatóinak egyik igen fontos fel-

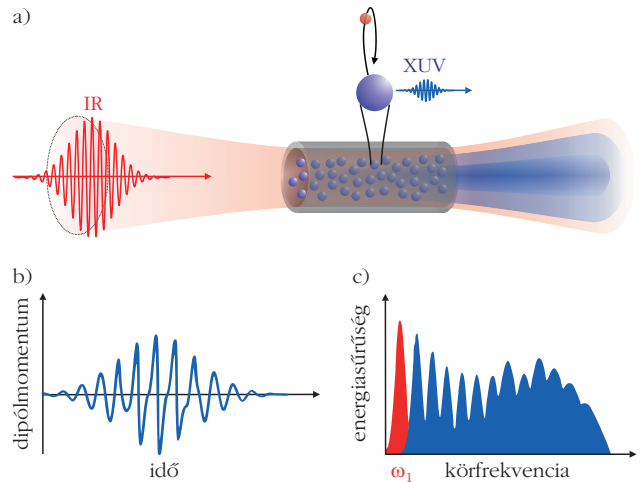
adata, hogy megvizsgálják, miként lehet a keltéshez használt közeg makroszkopikus válaszát, azaz a fázisillesztést optimalizálni. A korábbi, *Fizikai Szemlében* megjelent írásokban a kiterjedt közeg makroszkopikus válasza csak kis szerepet kapott [4], így most célunk a fázisillesztési probléma rövid ismertetése, illetve az attoszekundumos impulzuskeltés makroszkopikus optimalizációjával kapcsolatos legfrissebb eredmények rövid bemutatása.

Atomok nemlineáris optikai válasza nagy intenzitású lézerterekben

Napjainkban az attoszekundumos impulzusok keltéséhez a legtöbb esetben gáz céltárgyra fókuszált nagy intenzitású lézerimpulzus magasrendű harmonikusait használják. A magasharmonikus-keltés mikroszkopikus jellemzése már többször szerepelt a *Fizikai Szemle* hasábjain is [2–4], azonban azon oldalakon általában a fény és anyag kölcsönhatásának félklasszikus leírását, az úgynevezett háromlépcsős modellt részletezték [4]. E modell nagy előnye a szemléletesség, valamint az, hogy a mechanika és elektromágnesség legegyszerűbb eszközeivel teszi lehetővé a probléma tárgyalását. Most egy kicsit más szemléletmóddal közelítjük meg ezt a problémát annak érdekében, hogy a később, a fázisillesztés és a makroszkopikus válasz tárgyalásához jobban illeszkedjék.

A magasharmonikus-keltés során az atom és a lézerimpulzus kölcsönhatásában a kulcsszót a *nemlinearitás* jelenti. A magasharmonikus-keltés nagy előnye más XUV- és röntgenforrásokkal szemben, hogy a nemlineáris folyamat révén a keltő lézerimpulzus kedvező koherenciatulajdonságait a keltett magasabb frekvenciájú sugárzás „megörökli”. A folyamat hatásfoka igen alacsony, ezért számottevő energiájú XUV-impulzus csak akkor érhető el, ha létrehozásához nagy teljesítményű lézerimpulzust használunk, és a keltésben nagyszámú atom fázisillesztett módon vesz részt.

Ahogy a háromlépcsős modellből ismeretes, a lézer infravörös (infrared, IR) elektromos terének hatására az atom ionizálódik, a kilépő elektron a lézer terében gyorsul, majd az atomtörzssel rekombinálódva XUV-sugárzás keletkezik az elektron lézertérben szerzett többlet kinetikus energiájának köszönhetően (*1.a ábra*). A folyamatot más szempöngből tekintve az XUV-sugárzás keltése annak köszönhető, hogy az ionizált elektron és az atomtörzs együttese a változó elektromos térben oszcilláló elektromos dipólusként viselkedik (kvantummechanikailag átmeneti dipólómomentum). Mivel a dipólómomentum változása nem tökéletesen harmonikus (*1.b ábra*), így a keltett dipólószugárzás sem tisztán egyetlen, adott frekvenciájú elektromágneses sugárzást jelent. Akár a gitárhúr rezgéseinél, a nemlinearitás okán a gerjesztő frekvencia (magasharmonikus-keltés esetén a lézerimpulzus központi vagy vivőfrekvenciája) magasabb rendű felharmonikusai is megjelennek a keltett sugárzásban (*1.c ábra*). A kölcsönhatás eredményeként a céltárgyként

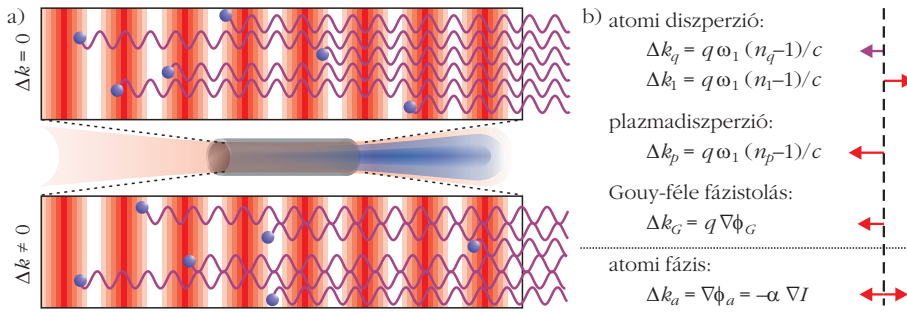


1. ábra. a) A magasharmonikus-keltés folyamatának szemléletes bemutatása. A háromlépcsős modellnek megfelelően a rövid lézerimpulzus hatására a gázcellában lévő atomok ionizálódnak, a kilépő elektronok a lézer terében gyorsuló mozgást végeznek, majd az elektronok iontörzshöz való visszatérésével XUV-sugárzás keletkezik (ábra forrása: [5]). b) Az ionizált elektron és az iontörzs által alkotott dipólus dipólómomentumának időbeli változása. c) Az ω_1 központi körfrekvenciájú lézerimpulzussal keltett dipólószugárzás spektrális energiasűrűsége: a magasharmonikus spektrum.

használt gázcellában elhelyezkedő minden atom az öt érő lézersugárzásnak megfelelő, az *1.c ábrán* láthatóhoz hasonló spektrumú sugárzást bocsát ki. A nagy energiájú XUV-sugárzás keltéséhez az szükséges, hogy az egyes atomok által keltett sugárzás konstruktív interferenciája a lehető legszélesebb spektrális tartományon teljesüljön. Az interferencia eredményeképp létrejövő sugárzás erősségét az egyes elemi forrásokból származó elektromágneses hullámok relatív fázisa határozza meg. Ezért hívják ezt a problémakört fázisillesztésnek (vagy éppen fázisillesztetlenségnek). A következőkben így a cél az, hogy röviden bemutassuk a keltett sugárzás fázisát befolyásoló tényezőket és azt, hogy ezek miként hatnak a fázisillesztésre.

Fázisillesztés

A magasharmonikus-keltés során keletkező sugárzás fázisát egy adott térbeli pontban számos tényező befolyásolja. Egyrészt, mivel hullámokról van szó, értelemszerűen a fázis időben és térben is változik. *Fourier* tétele értelmében a sugárzást monokromatikus (harmonikus) komponensek összegére bonthatjuk, így elegendő a térbeli változásokat vizsgálni az egyes harmonikus komponensekre. A nemlineáris hullámegyenlet segítségével emellett egyszerűen megmutatható, hogy sok esetben elegendő mindössze egy Δk -val jelölt „hullámszámvektor-különbséget” elemezni, ami megadja az adott frekvenciájú sugárzás és az azonos frekvencián, a közegben keltett polarizáció „hullámszámvektorainak” eltérését. A Δk mennyiség a sugárzás és a polarizáció fáziskülönbségének térbeli gradienseként számolható, ezért hullámszámvektor-ként értelmezhető. Közvetlenül a fáziseltérések helyett ezen hullámszámvektorokkal való kezelésmód



2. ábra. a) Fázisillesztett (felül) és fázisillesztetlen (alul) gázban történő magasharmonikus-keltés szemléletes bemutatása. b) A Δk fázisillesztést befolyásoló tényezők a q -adik harmonikus esetében. Jobb oldalt az optikai tengelyen jellemző, az egyes tagokhoz köthető hullámszámvektorok láthatók. A lila színű nyíl a tovaterjedő magasharmonikus sugárzás hullámszámvektorához kötődő, míg a piros színű nyilak a lézertér által keltett polarizáción keresztül fellépő tényezőket jelölik. A nyilak hossza nem reprezentatív a tényezők relatív nagysága tekintetében.

azért szemléletes, mert így a $\Delta k = 0$ jelenti a tökéletes fázisillesztettséget, tehát a teljes konstruktív interferenciát, hiszen ez esetben a két mennyiség fázisának eltérése állandó a hullámterjedés során. Minden zérustól eltérő érték valamilyen mértékű fázisillesztetlenséget jelent. Minél kisebb Δk értéke, annál jobb a fázisillesztés.

A 2.a ábra két különböző fázisillesztettséggű esetet mutat be. A első esetben (felső ábra) az egyes atomok által keltett elemi sugárzások tökéletes fázisillesztettségben vannak, hiszen a terjedési irányra merőleges síkokban (vörös sávok) hullámhegy hullámhegygel találkozik. A második esetben (alsó ábra) ez nem teljesül, destruktív interferencia lép fel, és így a gázcellából kilépő sugárzás kisebb energiájú, mint az első esetben. A 2.b ábrán láthatók a fázisillesztést befolyásoló fázistényezők, amelyek két csoportra oszthatók: a hullámterjedés okán a lézertérben, illetve az XUV-sugárzásban bekövetkező fázisváltozásokból eredők, valamint a sugárzaskeltési folyamathoz kapcsolódók (a két csoportot a 2.b ábra felsorolásában pontozott vízszintes vonal választja el). Az első csoportba tartozik a semleges atomok diszperziója, amit elsősorban a gáz a lézer hullámhosszán és a vizsgált harmonikus hullámhosszán mért törésmutatója határoz meg (n_l és n_q). Emellett az ionizáció során az atomokból kiszakadó elektronok is hozzájárulnak a törésmutatóhoz (n_p) és így a hullámterjedés sebességéhez, amit plazmadiszperzióknak nevezünk. A harmadik hullámterjedéshez kötődő tag a Gouy-féle fázistolás (ϕ_G), ami amiatt lép fel, hogy fókuszált lézernyalábbal (és nem végtelen síkhullámmal) történik a keltés. A második csoportba az atomi fázis tartozik, ami a magasharmonikus-keltés mikroszkopikus folyamatához kötődik, és a lézertér intenzitáseloszlása (I) befolyásolja a kölcsönhatási térfogatban (az intenzitásgradiens és az atomi fázis kapcsolatát meghatározó α paraméter az úgynevezett rövid és hosszú elektronpályákra eltérő – az elektrontrajektóriákról bővebben a korábbi írásokban lehet olvasni [4]). A 2.b ábra színes nyilai azt szemléltetik, hogy az optikai tengelyen ezek a hullámszámvektor-eltérések tipikusan milyen irányúak. A nyilak színei egy, az előzőtől eltérő csoportosítást mutatnak, amely illeszkedik Δk korábbi definíciójához. A színek szerinti

felosztás szerint az adott tényező a tovaterjedő XUV-sugárzás hullámszámvektorában megjelenő (lila), vagy a keltett polarizáció hullámszámvektorának komponensét jelenti, azaz az utóbbi a lézertér fázisából adódik (piros).

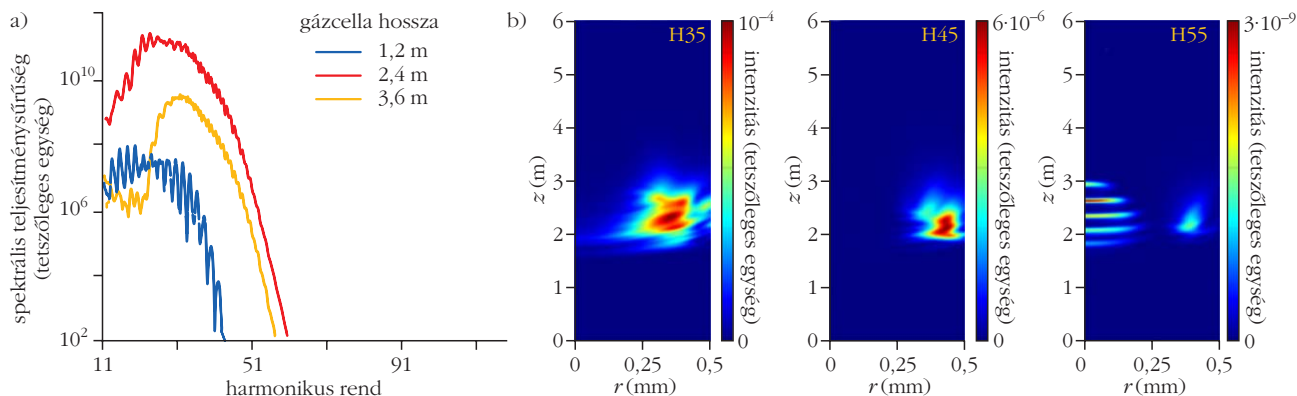
Ahogy a fentiekből is kiderül, a fázisillesztést a kísérleti paraméterek határozzák meg, hiszen például a törésmutatót a gáz nyomása, a Gouy-fázistolás mértékét a cellahossz mentén a fókuszálás erőssége befolyásolja. Tehát ahhoz,

hogy nagy energiájú XUV-sugárzás és attoszekundumos impulzus keltésére legyen lehetőségünk, a lézer és a kísérleti elrendezés paramétereit (a fókuszáló elem fókuszátvolsága; a lézernyaláb mérete; az impulzus időbeli hossza, energiája stb.), valamint a kölcsönható közeg tulajdonságait (gáz anyagi minősége, nyomása, a gázcella hossza stb.) kell megfelelően megválasztani. Ezt jelenti az *attoszekundumos impulzus-keltés makroszkopikus optimalizációja*, és az erre irányuló törekvéseket mutatunk be a továbbiakban.

A kísérleti elrendezés felskálázása

Fontos megemlíteni, hogy az elmúlt évek jelentős lézertechnológiai fejlesztéseinek hatására a magasharmonikus-keltési kísérletekben a lézerimpulzus teljesítménye már nem korlátozó tényező: a keltéshez szükséges küszöbintenzitás ($1\text{--}6 \cdot 10^{14}$ W/cm²) gyenge fókuszálás esetén is elérhető, ezért a folyamat optimalizálása különböző geometriai elrendezésekben történhet. Ahogy ez a korábbiakból kiderült, a kísérlet kiemenetén megfigyelhető XUV-sugárzás energiáját és emellett minden egyéb tulajdonságát is (spektrális tartomány, divergencia, időbeli jellemzők stb.) a makroszkopikus közegben kialakuló fázisillesztés határozza meg. Bár, ahogy a fentiekből is kiderült, az optikai tengelyen viszonylag egyszerű kifejezések adhatók a fázisillesztés jellemzőire és az azt befolyásoló tényezőkre, valójában a fázisillesztettség a keltő lézerimpulzus tér- és időbeli, illetve a keltő gáz céltárgy geometriai tulajdonságaitól erősen és nem triviális módon függ. A fázisillesztés tér- és időbeli tulajdonságai miatt a nagyobb bemenő lézerteljesítmény nem garantálja az attoszekundumos impulzusok nagyobb teljesítményét.

A nemlineáris optikai folyamatok leírására használt modell skálázási azonosságait figyelembe véve *Heyl* és munkatársai megmutatták, hogy egy létező kísérleti elrendezés paramétereit (transzverzális és longitudinális távolságok, a kölcsönhatásban részt vevő gáz sűrűsége) egy nagyobb impulzusenergia esetén – a meghatározott módon skálázva – az új elrendezés azonos konverziós határfokkal rendelkezik [6]. Ez a felis-



3. ábra. a) A SYLOS GHHG LONG nyalábvonal szimulációjakor az optimális paraméterhalmazzal kapott magasharmonikus teljesítményspektrumok három különböző cellahossz esetén. b) Három magasharmonikus (35., 45. és 55.) intenzitásának változása a gázközegben való terjedés során. A z az optikai tengellyel párhuzamos, az r pedig az arra merőleges tengely (a modell hengerszimmetriát feltételez).

merés lehetővé teszi, hogy a kísérletileg optimalizált elrendezést – egy esetleges lézerfejlesztést követően – a lézerimpulzusunk energiája növelésének megfelelően áttervezzük (felskálázzuk). Az ELI-ALPS kutatóintézet SYLOS lézerének csúcsteljesítménye lényegesen meghaladja a jelenleg magasharmonikus-keltésre használt lézerimpulzusok teljesítményét [1, 7], így a SYLOS által meghajtott attoszekundumos nyalábvonalak tervezése elméleti megfontolások alapján történt. A tervek különböző – már létező – kísérleti elrendezések felskálázásán alapulnak. A két – megvalósítás alatt álló – elrendezést numerikus modellszámításokkal teszteltük. Elsődleges célunk az volt, hogy a kísérleti paraméterek független változtatásával meghatározzuk a paraméterek értékeinek optimumát a növekvő lézer teljesítmények „okos felhasználása” érdekében. Másrészt a különböző geometriájú keltések esetén a keltett XUV-sugárzás tulajdonságait vizsgáltuk.

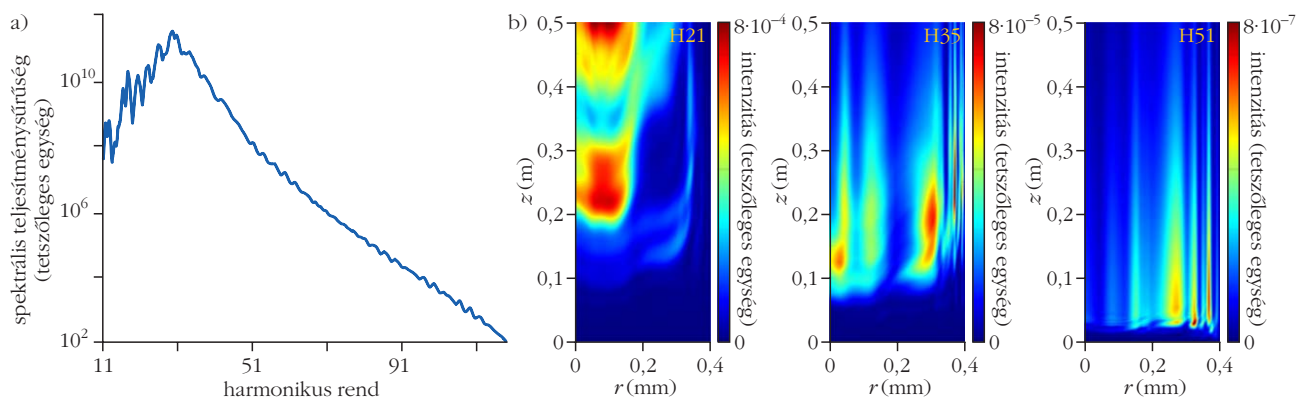
Az általunk használt numerikus modell lehetővé teszi [8], hogy a nagy intenzitású lézertér és a makroszkopikus kiterjedésű gáz céltárgy nemlineáris kölcsönhatását vizsgáljuk. A számítások során a lézerimpulzus – ionizált közegben való terjedése során bekövetkező – torzulását, a lokálisan meghatározott lézertér és az atomok/ionok kölcsönhatását, illetve a mikroszkopikusan keltett elemi magasharmonikus sugárzás közeg-

beli terjedése utáni szuperpozícióját határozzuk meg. A modell alkalmazhatóságát számos kísérleti elrendezésben teszteltük, és a kísérleti és numerikus eredmények megfelelő egyezését tapasztaltuk.

A makroszkopikus válasz optimalizálása

Az optimalizálást a két SYLOS alapú nyalábvonal esetén végeztük el. Az egyik nyalábvonal (GHHG SYLOS LONG [1, 7]) nagyon laza fókuszlást ($f = 55$ m), valamint hosszú (akár 6 m) és alacsony nyomású gázcellát alkalmaz. A másik (GHHG SYLOS COMPACT [1, 7]) kevésbé laza fókuszlást ($f = 10$ m), valamint nagy nyomású (több bar nyomás) gázfúvókát (néhány milliméteres kölcsönhatási hossz) használ. Az alacsony nyomású gáz céltárgyat alkalmazó LONG nyalábvonal esetén az argon gáz nyomását 0,0025 és 2,5 mbar között, a cella hosszát 1,2 és 6 m között, a bemenő nyaláb átmérőjét 30 és 75 mm között, az impulzus energiáját 2 és 200 mJ között, a cella fókuszpontához viszonyított relatív pozícióját pedig $-7,5$ és -3 m között változtattuk (a negatív érték azt jelöli, hogy a gázcella belépő síkja a fókuszló elem és a geometriai fókuszlás között helyezkedik el). Összesen 3360 eset összehasonlításával megkerestük a legnagyobb XUV-foton-

4. ábra. a) A SYLOS GHHG COMPACT nyalábvonal szimulációjakor az optimális paraméterhalmazzal kapott magasharmonikus teljesítményspektrumok. b) Három magasharmonikus (21., 35. és 51.) intenzitásának változása a gázközegben való terjedés során. A z az optikai tengellyel párhuzamos, az r pedig az arra merőleges tengely (a modell hengerszimmetriát feltételez).



számot eredményező esetet. Optimálisnak ez esetben a 1,25 mbar gáznyomás, 2,4 m cellahossz, 45 mm nyalábátmérő, 40 mJ impulzusenergia, -3 m cellapozíció paraméteregyüttest találtuk. A fenti paraméterhalmaz – és kiemelten az, hogy nem a legnagyobb bemenő impulzusenergia esetén kaptuk a legnagyobb XUV-fluxust – alátámasztja a korábban említett tényt, hogy a fázisillesztés miatt a nagyobb lézerteljesítmény nem garantálja a nagyobb magasharmonikus-teljesítményt.

A magasnyomású céltárggyal rendelkező COMPACT nyalábvonal esetén 351 esetet hasonlítottunk össze. Ennél a nyalábvonalnál a változtatott paraméterek (a kísérleti megvalósításhoz igazodva): a bemenő lézernyaláb csonkolásához használt írisz átmérője (20–300 mm), a gázfúvóka fókuszponthoz mért relatív pozíciója (-300–0 mm) és az argon gáz nyomása (0,5–2 bar). A kölcsönhatási hossz minden esetben 0,5 mm volt, míg a lézernyaláb átmérője 60 mm. Ebben a paramétertérben a 120 mm íriszátmérő, -100 mm fúvókapozíció és 2 bar gáznyomás értékek esetén adódott maximálisnak a keltett sugárzás erőssége. A két optimális esetet – röviden – a 3. és 4. ábrák mutatják be.

Mindkét esetben a keltett XUV-fluxusra optimalizáltunk, a keltett sugárzás térbeli és spektrális jellemzői különbözők. Az így elvégzett elemzés egyik tanulsága, hogy a nagyon sok változó miatt lokális maximumokat lehet – akár kísérletileg, akár numerikusan – keresni. Az egyes fluxusmaximumok esetén azonban az XUV-sugárzás egyéb jellemzői (jelentősen) eltérők lehetnek. Fontos, hogy bár a használt fókuszálási és kölcsönhatási térfogat-geometriák merőben különbözők, mindkét nyalábvonal intenzív attoszekundumos impulzusokat szolgáltat majd. Azonban, ahogy az a 3.b és 4.b ábrákon is látható, a sugárzás térbeli

jellemzői várhatóan különbözők lesznek, és így a két nyalábvonal komplementerként szolgálhat egymásnak, attól függően, hogy az adott kísérlet milyen sugárzási paramétereket igényel.

Konklúziók

A fázisillesztés rövid áttekintése utána bemutattunk néhány szimulációs eredményt, amely jól demonstrálja ezen problémakör relevanciáját a magasharmonikus sugárzás és attoszekundumos impulzusok keltésekor. A ELI-ALPS két, megvalósítás alatt álló nyalábvonalának optimalizációt célzó vizsgálata emellett útmutatóul szolgál a későbbi kísérletekhez, valamint megmutatta, hogy majd milyen jól kiegészíti egymást ez a két nyalábvonal úgy, hogy közel azonos teljesítményű attoszekundumos impulzusokat szolgáltatnak majd.

Irodalom

1. <http://eli-hu.hu/>
2. Farkas Győző: Attoszekundum időtartamú fényimpulzusok. *Fizikai Szemle* 56/12 (2006) 408–412.
3. Krausz Ferenc: Atomok és elektronok mozgásban. *Fizikai Szemle* 52/1 (2002) 12.
4. Varjú Katalin: Attoszekundumos impulzusok. *Fizikai szemle* 58/3 (2008) 87–92.
5. Balogh Emeric: *Macroscopic study and control of high-order harmonic and attosecond pulse generation in noble gases*. PhD értekezés, Szegedi Tudományegyetem (2014).
6. Christoph Heyl és mtsai.: Scale-invariant nonlinear optics in gases. *Optica* 3 (2016) 75–81.
7. Sergei Kühn és mtsai.: The ELI-ALPS facility: the next generation of attosecond sources. *Journal of Physics B* 50 (2017) 132002.
8. Valer Tosa és mtsai.: Macroscopic generation of attosecond-pulse trains in strongly ionized media. *Physical Review A* 79 (2009) 043828.

KVANTUMKONTROLL FÁZISMODULÁLT LÉZERIMPULZUSOKKAL

Csehi András^{1,2}, Halász Gábor³, Vibók Ágnes^{1,2}

¹Debreceni Egyetem, Elméleti Fizikai Tanszék

²ELI-ALPS, ELI-HU Non-Profit Kft., Szeged

³Debreceni Egyetem, Információ Technológia Tanszék

Anyagi rendszerek erős lézertérben történő viselkedésének megértése napjaink egyik intenzíven kutatott területe. A közelmúltban elvégzett kísérleti és elméleti kutatások számos új fény-anyag kölcsönhatás szolgáltatata jelenséget fedeztek fel, beleértve a molekulák irányított-ságát, magas felharmonikusok keltését, fotoionizációt, fotofragmentációt stb. A 20. század végére a femtoszekundumos lézerimpulzusok kifejlesztésével lehetővé vált az úgynevezett pumpapróba-kísérletek kidolgozása, amelyek segítségével molekuláris rendszerek atommagdinamikájának szabályozását sikerült megvalósítani. A femtoszekundumos fotokémia megalapozásáért *Ahmed Zewail* 1999-ben kémiai Nobel-díjat kapott [1.b].

A kísérleti apparátus tökéletesedésével párhuzamosan a gerjesztett elektronállapotokat leíró úgynevezett „multi-reference” típusú elektronszerkezeti számítási módszerek, illetve a dinamikai Schrödinger-egyenlet megoldására kidolgozott eljárások is széles körben elterjedtek, s így lehetővé vált a kísérleteket támogató, azokat előkészítő, illetve értelmező számítások elvégzése is. Egymásra épülő numerikus szimulációk segítségével – gyakran „numerikus kísérleteknek” is nevezik ezeket – nagy pontossággal lehet összetett kémiai dinamikai számításokat (például fotodisszociációt, fragmentációt, izomerizációt, ionizációt, pumpapróba-kísérleteket [2] stb.) végezni.

Az egyensúlyi állapotból kibillentett molekulák a gerjesztést követően nagyon sok reakcióutat bejárhatnak. Ezek közül néhányat mutat az 1. ábra: különböző izomerek alakulhatnak ki, a molekula disszociálhat vagy visszajuthat az alapállapotú egyensúlyi geometriába is. A rendszer egy előre meghatározott végállapotba juttatásához és ezáltal a molekula mozgásának szabályozásához megfelelően megválasztott energiájú, intenzitású, szélességű, illetve időkéreltetésű lézerpulzusokra van szükség. Ilyen módon megvalósítható, hogy az időfüggő maghullámfüggvény a potenciálisenergiafelület egy adott tartományán haladjon át a kívánt végállapot felé, miközben a lézer hatására, és/vagy a molekulában természetesen is jelen lévő elfajulásokon keresztül ide-oda transzferálódik a különböző energiafelületek között. Molekulák kémiai dinamikájának szabályozása erősen kutatott terület, amely mostanra már széles szakirodalommal rendelkezik [3, 4].

A nagyon gyors (femtosekundos, 10^{-15} s) molekuladinamikai folyamatok szinte mindig elektronállapotok közötti elfajulásokon keresztül zajlanak le. Az elektronállapotú elfajulásokra tipikus példaként szolgálnak az úgynevezett kónikus kereszteződések (conical intersection = CI), amelyek az elfajulások kör-

Az ELI-ALPS projekt (GINOP-2.3.6-15-2015-00001) az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósul meg. A kutatást az EFOP-3.6.2-16-2017-00005 azonosítójú, EU társfinanszírozású projekt támogatta.



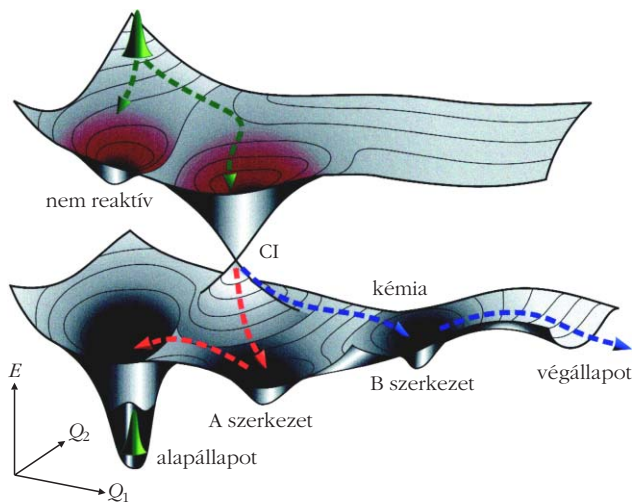
Csébi András 2010-ben szerzett fizikus diplomát, majd 2014-ben doktori fokozatot a Debreceni Egyetemen. A DE Elméleti Fizikai Tanszék adjunktusa és az ELI Elméleti és Számítógépes Molekulaszerkezet és Dinamika csoport tagja. Molekulák elektron szerkezeti elfajulásaival és azok környezetében lejátszódó magdinamika szimulációjával foglalkozik, a semleges és töltött molekulák lézerral indukált disszociációjának kontrollálási lehetőségeit kutatja. Rendszeresen publikál nemzetközi folyóiratokban.



Halász Gábor (1961) fizikus, a DE Informatikai Tanszék egyetemi tanára. Jelenleg ultragyors molekuláris kapcsolók vizsgálatával, illetve molekuláris rendszerek csatolt elektron- és magdinamikájának együttes leírásával foglalkozik.



Vibók Ágnes (1962) fizikus, a DE Elméleti Fizikai Tanszék egyetemi tanára és az ELI Elméleti és Számítógépes Molekulaszerkezet és Dinamika csoport vezetője. Kutatási területe: atom- és molekulafizika. Ezen belül jelenleg nemadiabatikus, ultragyors kvantumdinamika-folyamatokat, illetve molekulák erős elektromos térrel való kölcsönhatását vizsgálja.

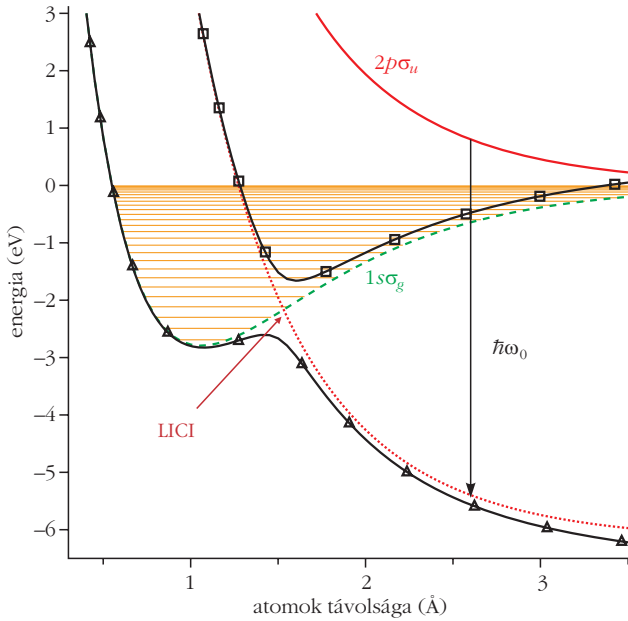


1. ábra. Molekuláris reakcióutakhoz tartozó alap- és gerjesztett állapotú potenciálisenergia-felületek szemléltetése. Az elektronállapotok közötti kónikus kereszteződés (CI) kulcsszerepet játszik az ultragyors átmenetekben [1].

nyezetében kettőskúp alakúak és számos érdekes tulajdonsággal rendelkeznek. Többek között fotokémiai tölcserként – amelyeken keresztül a molekulák sugárzásmentesen, akár 3-4 nagyságrenddel gyorsabban le tudnak gerjesztődni, mint a hagyományos sugárzásos lebomlás során – szolgálnak a gerjesztett rendszer számára. Kétatomos molekulák kivételével, három- vagy többatomos molekulákban szinte mindenütt jelen vannak és karakterisztikus elektronszerkezeti sajátásgként tekinthetők.

A közelmúlt elméleti kutatásainak eredményeként sikerült megmutatni, hogy kónikus kereszteződések lézerefény segítségével is létrehozhatók, akár még kétatomos molekulákban is [5.a]. Ilyenkor egy, a két elektronállapot közötti energiával megegyező energiájú rezonáns lézerpulzus a molekula átmeneti dipólusmomentumán keresztül a forgási és rezgési szabadsági fokokat csatolja, ami a kónikus kereszteződés kialakulásához vezet. A fényel indukált kónikus kereszteződések (light-induced conical intersection = LIC) az anyag-fény kölcsönhatás egy új vetületét jelentik, és jelentősen módosítják a molekulák dinamikai tulajdonságait az elektromos tér nélküli esethez képest. Két évvel ezelőtt összefoglaló írás jelent meg a *Fizikai Szemlében* [6], amely részletesen tárgyalja a LIC kialakulásának elméleti hátterét, valamint elhelyezi azt a lézer-anyag kölcsönhatás területén. Az utóbbi években – feltételezve a „fényel indukált kónikus kereszteződés-képet” számos elméleti és kísérleti eredmény született a kétatomos molekulák disszociatív dinamikájának leírására [3, 5, 7].

Lézerefény segítségével tehát lehetőség nyílik arra, hogy molekulákban a természetesen is jelenlévő elfajulásokhoz minden tekintetben hasonló, degenerált elektronállapotokat mesterségesen hozzunk létre. Erre legkézenfekvőbb és legegyszerűbb alanyként a kétatomos molekulák szolgálnak, amelyekben – külső elektromos tér hiányában – szimmetriaokokból kónikus kereszteződések nem fordulhatnak elő. Van



2. *ábra.* A D_2^+ molekulaion potenciálisenergia-görbéi. A diabaticus alap- ($1s\sigma_g$) és gerjesztett ($2p\sigma_u$) állapotokat zöld szaggatott és piros folytonos vonalak jelölik. A lézertény hatását reprezentáló úgynevezett „dressed” (felöltöztetett) gerjesztett állapot ($2p\sigma_u - \hbar\omega_0$, piros pontozott vonal) és az alapállapot között megjelenő LICI-t nyíl mutatja ($\theta = \pi/2$). A folytonos fekete vonalak háromszögekkel és négyzetekkel a lézer forgató hatására kialakuló adiabaticus energiafelületek $\theta = 0$ -nál vett metszeteit jelölik az alap- és gerjesztett állapotokra vonatkozóan.

azonban egy lényeges különbség a természetes kónikus kereszteződések és a lézerral indukált megfelelőik között. Nevezetesen, míg a természetes CI-k nem szabályozhatók, addig az elektromos térrel létrehozottak igen. Ezen utóbbiak energetikai pozícióját a lézerimpulzus frekvenciájával, míg a keresztező energiafelületek csatolásának erősségét annak intenzitásával szabályozhatjuk. A lézertér intenzitását és energiáját változtatva eltérő hatású kónikus kereszteződések hozhatók létre, mintegy új irányt nyitván a molekulás kvantumszabályozás területén.

Érdekes jelenség jön létre, amikor a lézerimpulzus frekvenciája (és ezzel együtt az azt felépítő fotonok energiája is) időben változik. Ekkor ugyanis az indukált kónikus kereszteződés pozíciója az impulzus időtartama alatt folyamatosan változik (a LICI vándorol). Az ilyen fázismodulált (vagy csörpölt) lézerimpulzusokkal folyamatosan tudjuk változtatni a LICI helyzetét, és megfelelő feltételek teljesülése esetén elérhetjük, hogy a propagáló maghullámfüggvény lekövesse azt. Jelen munkában eltérő módon csörpölt impulzusok magdinamikára kifejtett hatását szeretnénk vizsgálni, illetve meghatározni azt a fázismodulációt, amely a disszociációs valószínűséget maximalizálja.

Fázismodulációk

A D_2^+ molekulaionnal végzett magdinamikai vizsgálatunk során két elektronállapot közelítést használtunk. A D_2^+ ion alap- és első gerjesztett elektronállapotait (2.

ábra) vettük számításba, ugyanis ezek energetikailag jól elkülönülnek a többi állapottól. Kiindulásként a semleges D_2 molekulát egy pumpaimpulzus segítségével hirtelen ionizáljuk. Ezt követően az alapállapotban visszamaradó D_2^+ ion oszcillálni kezd, mert a semleges rendszer vibrációs alapállapota már nem lesz sajátállapota a D_2^+ ion Hamilton-operátorának (3.a *ábra*). Ezután különböző késleltetési időkkel bekapcsolva a fázismodulált próba lézerimpulzust, már tanulmányozhatóvá válik a rendszer fotodisszociációs dinamikája.

Alapvetően kétféle csörppel foglalkoztunk. Az első egy kísérletileg könnyen előállítható, de a pulzus kiszélesedését eredményező moduláció, amelyben a frekvencia időfüggése lineáris [8.a–b]:

$$\omega(t) = \omega_0 + \alpha(t - t_k). \quad (1)$$

Simulációinkban figyelembe vettük a pulzus – kísérleti megvalósítás során bekövetkező – kiszélesedését, azaz hosszának megnövekedését és az intenzitásának csökkenését. A második pedig egy úgynevezett „önkényes” csörp [8.c], amelyben az $\omega(t)$ frekvenciafüggvényt az oszcilláló magsűrűséghez adjusztáltuk (3.b *ábra*) olyan különböző módokon, hogy – a magsűrűség időfejlődését minél pontosabban követve – maximális disszociációs hozamot érhesünk el. Ezen impulzusokat a következő formában adhatjuk meg:

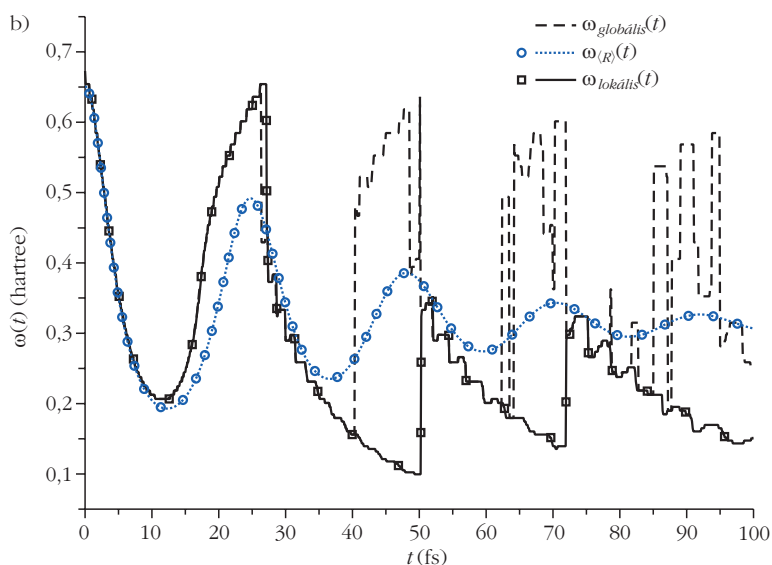
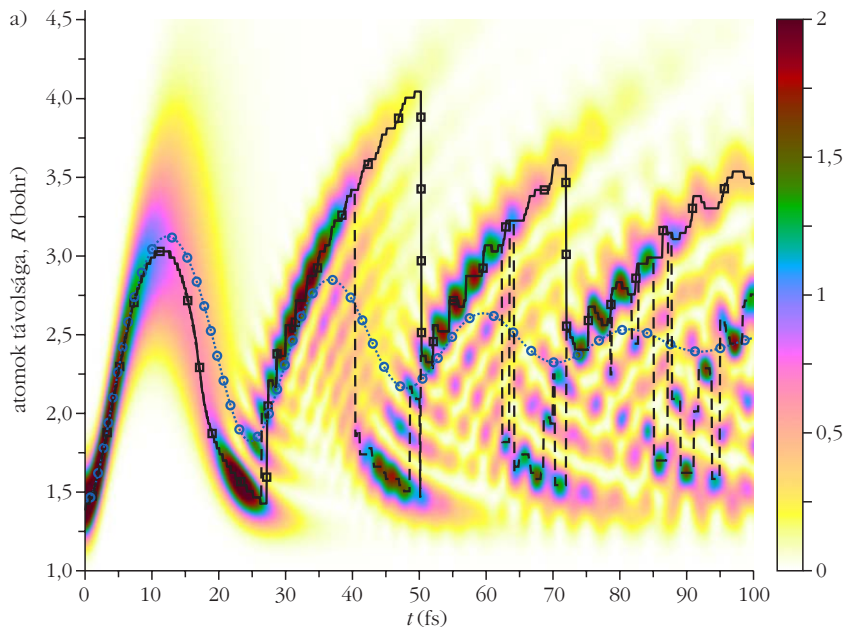
$$E_x(t) = \epsilon_0 f(t, t_k, T_p) \cos(\phi_x(t)), \quad (2)$$

ahol ϵ_0 az elektromos tér amplitúdója (arányos a maximális intenzitás négyzetgyökével: $I_0 \sim \epsilon_0^2$), $f(t, t_k, T_p)$ a pulzus Gauss-burkolója, t_k a késleltetési idő, T_p a pulzus szélessége (az az idő, amíg az lokális intenzitás nagyobb, mint legnagyobb értékének fele), $\phi_x(t)$ pedig a fázis, amelyet a frekvenciafüggvény integráljaként kaphatunk meg:

$$\phi_x(t) = \int_0^t \omega_x(t') dt'. \quad (3)$$

Lineáris csörp esetén az α paraméter szabályozza az $\omega(t)$ viselkedését. Eszerint pozitívan csörpölt ($\alpha > 0$ – növekvő ω), negatívan csörpölt ($\alpha < 0$ – csökkenő ω) és transzformációkorlátozott ($\alpha = 0$) lézerimpulzusokról beszélhetünk. Az önkényes csörp esetén három különböző alakú $\omega(t)$ függvényt határoztunk meg a LICI megcélzott pozíciója alapján. Ezek az $\omega_{(R)}(t)$, ami az átlagos magtávolságoknál számolt energiakülönbségekből, az $\omega_{\text{globális}}(t)$, ami a magsűrűség globális maximumainál számolt energiakülönbségekből és $\omega_{\text{lokális}}(t)$, ami pedig a magsűrűség viszonylag nagy magtávolságnál megtalálható, viszonylag nagy értékkel bíró lokális maximumainál számolt különbségekből kaphatók [8.c]:

$$\hbar\omega_x(t) = V_{\text{gerj}}(R_x(t)) - V_{\text{alap}}(R_x(t)).$$



3. *ábra.* a) A D_2^+ molekulaion rezgése a semleges D_2 rendszer ionizációját követően: a színkód a maghullámfüggvény abszolút értékének négyzetét jelöli. A pontozott kék vonal a körökkel az átlagos R magtávolságot, a szaggatott fekete vonal a magsűrűség globális maximumértékeihez tartozó R magtávolságot, míg a folytonos fekete vonal a négyzetekkel a magsűrűség „távoli” lokális maximumait követi. b) A potenciálisenergia-görbék közötti rezonáns energiakülönbség értékei a fenti módszerekkel meghatározott $R(t)$ függvényekre vonatkozóan. Az így kapott $\omega(t)$ frekvenciafüggvényeket használjuk a lézerezés modulálása (csörpölése) során.

Fotodisszociáció

Molekuladinamikai szimulációs vizsgálatainkat az előbbiekben tárgyalt D_2^+ ionon végeztük, amely mindössze egyetlen elektronnal és – térmentes esetben – egyetlen olyan nukleáris szabadsági fokkal rendelkezik, amely befolyásolja a Hamilton-operátorban szereplő potenciális energia értékét. Modellrendszerünk egyszerűsége lehetővé teszi, hogy nagy pontossággal tudjuk leírni és értelmezni az előbbiekben tárgyalt, fázismodulált impulzusokkal indukált disszociációs dinamikát.

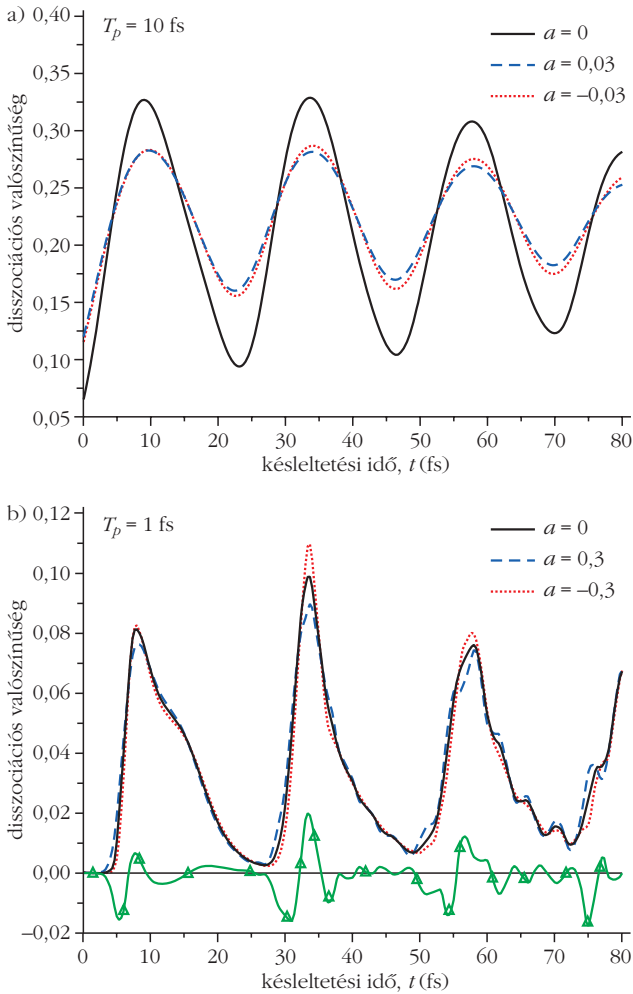
A maghullámfüggvény időfejlődését leíró dinamikai Schrödinger-egyenlet megoldására az MCTDH (multi configuration time-dependent Hartree) módszert használtuk, amely hatékony eljárás az ilyen jellegű problémák megoldására. A dinamika leírása során a kötött alapállapot ($1s\sigma_g$) mellett a taszító jellegű első gerjesztett állapotot ($2p\sigma_u$) vettük figyelembe (2. *ábra*, szaggatott zöld és folytonos piros vonalak). Ezen két állapotot különböző késleltetési idővel csatolva a disszociációs valószínűségeket, valamint a fragmentumok kinetikus energiaspektrumának tanulmányozására szorítkoztunk, amely információk a dinamikai Schrödinger-egyenlet megoldásaként kapott maghullámfüggvényből kinyerhetők. Ismert, hogy a D_2^+ egyetlen szabadsági foka miatt – a Neumann–Wigner-féle keresztezést tiltó szabály értelmében – külső tér hiányában kónikus kereszteződés nincs jelen a rendszerben. A lézerezés forgató hatásának köszönhetően azonban egy új dinamikai változó (θ , a lézerpolarizáció iránya és a molekulatengely közötti szög) jelenik meg, amely már lehetővé teszi, ha nem is természetes, de úgynevezett fényel indukált kónikus kereszteződés kialakulását az (R, θ) paramétersíkban. A LIC1 kialakulásához két feltétel egyidejű teljesülésére van szükség [6]:

$$\cos\theta = 0, \quad (\theta = \pi/2) \text{ és} \quad (4)$$

$$V_{alap}(R) = V_{gerj}(R) - \hbar\omega_0.$$

Nevezetesen kónikus kereszteződés a lézerezés polarizációjának iránya és a molekulatengely merőleges beállása mellett olyan magtávolságnál alakulhat ki, ahol a lézerezés fotonjainak energiája rezonáns az elektronállapotok közötti energiakülönbséggel (2. *ábra*). Ahhoz tehát, hogy az indukált kónikus kereszteződés hatását adekvát módon tudjuk figyelembe venni kétdimenziós (2D) dinamikai számítások szükségesek, amelyekben a rezgési szabadságok mellett egy újabb dinamikai változó, a θ szög jelenik meg. Bármilyen típusú is a frekvenciamodulálás, az $\omega(t)$ függvénynek megfelelően az indukált kónikus kereszteződés helyzete folyamatosan változik, miközben vándorol. Megfelelő csörpöléssel akár a magsűrűség időfejlődését is nyomon követhetjük.

Vizsgáljuk először a lineáris csörp hatásait! $T_p = 10$ fs és 1 fs félértékszélességű pozitívan, negatívan csörpölt és transzformációkorlátozott pulzusokkal kiváltott fotodisszociációs hozamokat mutat a 4. *ábra* ($I_0 = 10^{13}$ W/cm²,

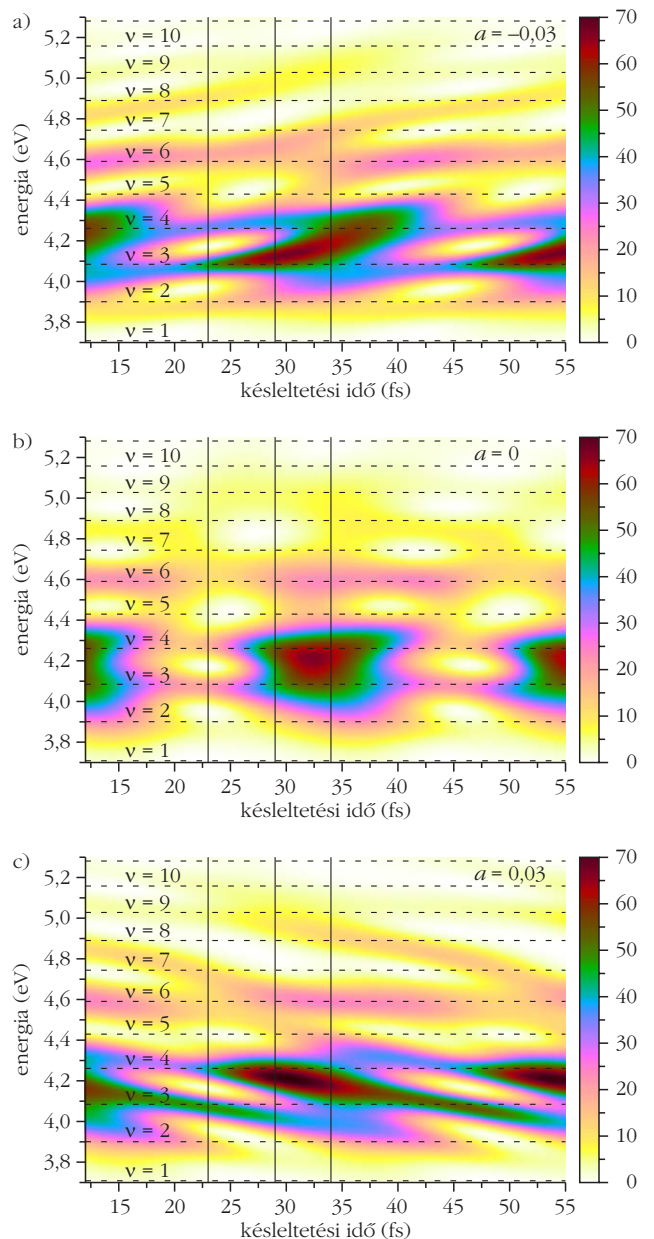


4. ábra. A D_2^+ molekula ionizációs valószínűségei a késleltetési idő függvényében lineárisan csörpölt (a) és rövid (b) pulzusok esetén. A transzformációkorlátozott pulzusokhoz tartozó valószínűségeket folytonos fekete vonal jelöli, míg a pozitívan, illetve negatívan csörpölt impulzusokkal kapott eredményeket rendre kék szaggatott és piros pontozott vonalak mutatják. Rövid pulzusok esetén a negatív és pozitív csörpök dissziációs valószínűségeinek különbségét a zöld vonal a háromszögekkel jelzi.

$\lambda_0 = 200 \text{ nm} \rightarrow \hbar\omega_0 = 6,199 \text{ eV}$ az ionizáció utáni $t_k = 0\text{--}80 \text{ fs}$ késleltetési időintervallumban. Ott vannak a görbék maximumai, ahol a magsűrűség nagy és kifelé mozog (3.a ábra), a minimumértékek pedig a befelé mozgó nagy sűrűségekkel korrelálnak. Legnagyobb eltérést a széles pulzus esetén kapjuk, ahol a csörpölt impulzusokkal kapott görbék összenyomódnak a transzformációkorlátozottéhoz képest, viszont a negatív és pozitív modulációk között számottevő eltérés nem tapasztalható. Ebből arra következtethetünk, hogy az összenyomódás a csörpölés során bekövetkező pulzuskiszélesedés eredménye. Jobban megfigyelve látható, hogy a negatív csörp nagyobb dissziációs értéket ad a görbék maximumainál, azaz amikor a hullámcsomag kifelé mozog. Ez leginkább rövid pulzusnál $t_k = 33 \text{ fs}$ környékén szembetűnő. Mindez összhangban áll azzal, hogy a negatív csörpölés hatására a csökkenő lézereenergia miatt a LICIT nagyobb magtávolságok felé vándorol, s emiatt több időt tölt együtt a szintén kifelé mozgó hullámcsomaggal, nagyobb eséllyel biztosítva a dissziációnak.

A kinetikusenergia-spektrumokat tekintve (5. ábra) arra a fontos megállapításra jutunk, hogy transzformációkorlátozott esetben a dissziáció jelentős hányada a $v = 3$ és 4 vibrációs állapotokból történik. Ez azzal van összefüggésben, hogy egyrészt az induló hullámcsomagunk ebből a két állapotból tartalmaz a legtöbbet, másrészt pedig a lézerpulzus központi energiája éppen ezen két állapot energiája között hozza létre a LICIT-t. Míg a minimumok helyzete változatlan marad, és méginkább hangsúlyosabbá válik a csörpölt esetekben (például $t_k = 23 \text{ fs}$ körül), addig a maximumok környezetében (például $t_k = 33 \text{ fs}$ körül) a pozitív és negatív csörpök ellentétes irányú eltoló-

5. ábra. A dissziálódó D_2^+ rendszer fragmentumainak kinetikusenergia-eloszlása a dissziációt kiváltó lézerpulzus késleltetési idejének függvényében. Az időközleltetés a semleges D_2 molekula ionizációjának pillanatához van viszonyítva. Az egyes panelek a negatívan (a), a pozitívan (c) csörpölt és a transzformációkorlátozott (b) pulzusokhoz tartozó eloszlásokat mutatják.



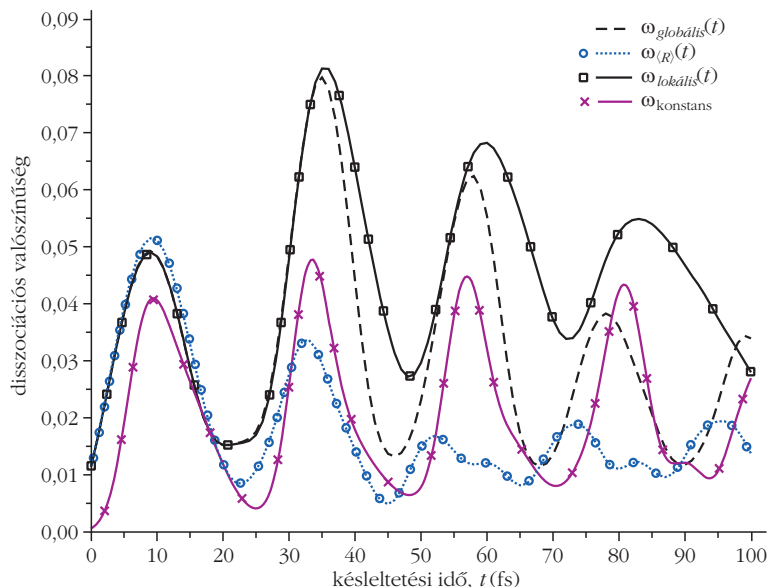
dást okoznak. Mindez szintén a LICI-vándorlás disszociációra gyakorolt hatásával magyarázható: negatív csörp esetén a kifelé mozgó LICI pozíciója energetikailag egyre magasabban lesz (2. ábra), emiatt a hullámcsomag magasabb vibrációs állapotokhoz tartozó komponenseinek disszociációja részesül előnyben, míg pozitív csörpnél éppen ellenkezően.

Térjünk át az úgynevezett önkényesen csörpölt impulzusok hatásának vizsgálatára. Ebben az esetben a pulzus fázisának modulálását közvetlenül az oszcilláló maghullámcsomag követése alapján tesszük meg. Három különböző frekvenciafüggvényt használtunk, amelyek rendre az átlagos magtávolságnál ($\omega_{(R)}(t)$), a hullámcsomag globális ($\omega_{\text{globális}}(t)$), illetve egyik lokális ($\omega_{\text{lokális}}(t)$) maximumához tartozó magtávolságoknál számolt potenciálisenergia-görbék különbségeiből adódtak (3. ábra). Az eredményeket szemléltető 6. ábrán jól látható, hogy a konstans frekvenciájú impulzusokhoz képest az $\omega_{(R)}$ a disszociációs görbékben sokkal kisebb csúcsokat eredményez a késleltetési idő függvényében. Ennek oka az, hogy a szétterülő hullámcsomag tipikusan kicsi értéket vesz fel az $\langle R \rangle$ helyen (lásd a 3.a ábrán). Ezzel szemben az $\omega_{\text{globális}}(t)$ jelentősen nagyobb valószínűségeket ad, amit már csak a nagy magtávolságoknál fellelhető lokális maximumokat követő csörpölés tud felülmúlni ($t_k > 35$ fs). Mindez azt jelzi, hogy a disszociáció vagy populációtranszfer mértékének maximalizálása során tekintettel kell lennünk arra is, hogy nem tisztán csak a maghullámfüggvény sűrűségének nagy értéke játszik fontos szerepet, hanem az is, hogy ez a nagy sűrűségérték nagy magtávolságnál jelenjen meg.

Kitekintés

A bemutatott eredmények egyértelműen alátámasztják, hogy kémiai dinamikai folyamatok elektromágneses térrel történő kvantumszabályozása során az alkalmazott lézerpulzus energiáján, intenzitásán és szélességén túlmenően kulcsfontosságú szerepet játszik a késleltetési idő, valamint a választott impulzuscsörpölési módszer is. Az időkésleltetés alkalmas megválasztásával egyaránt minimalizálható vagy maximalizálható a disszociáció vagy fragmentáció valószínűsége. A keletkező fragmentumok kinetikusenergia-spektrumában mérhető eltolódások okozhatók a csörpparaméterek alkalmas megválasztásával. Ez utóbbi jelenséget a közelmúltban már kísérletileg is kimutatták. A fragmentációs ráta maximalizálása szempontjából pedig a hullámcsomag lokális maximumainak követése bizonyult a legcélravezetőbbnek.

A fentiekben körvonalazott fényel indukált kónikus kereszteszűdésekkel történő molekuladinamika-szabályozást az eddigiekben csak kétatomos rendsze-



6. ábra. A D_2^+ molekulaion disszociációs valószínűségei a késleltetési idő függvényében, önkényesen csörpölt impulzusok esetén. A szaggatott fekete vonal, a pontozott kék vonal körökkel, valamint a folytonos fekete vonal négyzetekkel ugyanazt jelöli, mint a 3. ábrán. A lila vonal keresztekkel a transzformációkorlátozott ($\omega = 0,235$ hartree) pulzusok eredményeit mutatja.

rekre vizsgáltuk. Úgy gondoljuk azonban, hogy többatomos molekulák fotodinamikai folyamataiban az eddigieknél is fontosabb szerepet játszhatnak, tekintettel ezek összetettségére, illetve a gyakran előforduló, már eredendően meglévő természetes kónikus kereszteszűdésekre. Ilyen esetekben várható, hogy a természetes és indukált kónikus kereszteszűdés összejátéka új jelenségek sokaságához vezet a dinamikában.

Irodalom

- a) Dongping Zhong, Eric W.-G. Diau, Thorsten M. Bernhardt, Steven De Feyter, John D. Roberts, Ahmed H. Zewail: Femtosecond Dynamics of Valence-Bond Isomers of Azines: Transition States and Conical Intersections. *Chem. Phys. Lett.* 298 (1998) 129; b) Ahmed Zewail: *Femtochemistry: Atomic-Scale Dynamics of the Chemical Bond Using Ultrafast Lasers*. Nobel Lecture (1999).
- P. Decleva, N. Quadri, A. Perveaux, D. Lauvergnat, F. Gatti, B. Lasorne, G. J. Halász, Á. Vibók, *Sci. Rep.* 6:36613, DOI: 10.1038/srep36613, (2016).
- M. E. Corrales, J. González-Vázquez, G. Balardi, I. R. Solá, R. de Nalda, L. Bañares, *Nature Chem.* 6 (2014) 785.
- I. R. Solá, J. González-Vázquez, R. de Nalda, L. Bañares, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17 (2015) 13183.
- a) N. Moiseyev, M. Sindelka, L. S. Cederbaum, *J. Phys. B* 41 (2008) 221001; b) G. J. Halász, Á. Vibók, M. Sindelka, N. Moiseyev, L. S. Cederbaum, *J. Phys. B* 44 (2011) 175102; c) G. J. Halász, M. Sindelka, N. Moiseyev, L. S. Cederbaum, Á. Vibók, *J. Phys. Chem. A* 116 (2012) 2636; d) G. J. Halász, Á. Vibók, M. Sindelka, L. S. Cederbaum, N. Moiseyev, *Chem. Phys.* 399 (2012) 146; e) G. J. Halász, Á. Vibók, N. Moiseyev, L. S. Cederbaum, *Phys. Rev. A* 88 (2013) 043413; f) G. J. Halász, Á. Vibók, L. S. Cederbaum, *J. Phys. Chem. Lett.* 6 (2015) 348.
- Vibók Á., Halász G.: Fényel indukált elfajulások molekuláris rendszerekben. *Fizikai Szemle* 65/5 (2015) 146.
- A. Natan, M. R. Ware, P. H. Bucksbaum: Observation of quantum interferences via light induced conical intersections in diatomic molecules. e-print arXiv:1511.05626v1 (2015).
- a) A. Csehi, G. J. Halász, L. S. Cederbaum, Á. Vibók, *J. Chem. Phys.* 143 (2015) 014305; b) A. Csehi, G. J. Halász, L. S. Cederbaum, Á. Vibók, *J. Chem. Phys.* 144 (2016) 074309; c) A. Csehi, G. J. Halász, L. S. Cederbaum, Á. Vibók, *Faraday Discuss.* 194 (2016) 479; d) A. Csehi, G. J. Halász, Á. Vibók, *Chem. Phys.* 487 (2017) 97.

KOLLEKTÍV GERJESZTÉSEK VALÓS IDEJŰ MEGFIGYELÉSE FOTOEMISSZIÓ SORÁN

Tőkési Károly

MTA Atommagkutató Intézet, Debrecen
ELI-ALPS, ELI-HU Non-profit Kft., Szeged

Atomok, molekulák és szilárd testek részecskenyalábbal történő besugárzása az egyik leghatékonyabb módszer az anyag szerkezetének tanulmányozására. Attoszekundumos, ultrarövid lézerimpulzusokkal történő besugárzás, amelyeket magasrendű felharmonikusok előállításával (High Harmonic Generation, HHG) segítségével hoznak létre új perspektívát nyit a rendszerek szerkezetének megismerésében. A vizsgálatok újszerűsége abban rejlik, hogy az elektronok mozgása azok természetes, attomásodperces időskáláján figyelhető meg. A hihetetlenül rövid időintervallumokkal dolgozó attomásodperces fizika új tudományterület. Az attomásodperc a másodperc egymilliódród részének az egymilliódród része. Ez a kvantumfizika és az elektronok anyagbeli mozgásának természetes időskálája. Ez az az idő, amelyen belül a kémiai kötések kialakulnak, vagy amely alatt egy fotocella reagál a fényre. Csak az új, ultrarövid impulzusú lézerek által vált lehetővé, hogy mint egy filmen, valós időben figyelhessük meg az elektronok mozgását az atomokban vagy akár a szilárd testekben. A Szegeden épülő, lézerberendezés (ELI – „Extrém Lézerfény Infrastruktúra”, Extreme Light Infrastructure) egyedülálló beruházás a fény és az anyag kölcsönhatásának ezen újszerű tanulmányozására. A magyarországi létesítmény az attomásodperces tudományok egyik központja lesz. A rendszerek ilyen extrém intenzitások mellett és időskálán történő tanulmányozásához továbbfejlesztett vagy új elméleti modellek szükségesek, amelyek útmutatóként szolgálnak a kísérletekhez.

Az utóbbi évtizedben ultrarövid lézerimpulzusok segítségével az időfelbontásos fotoionizáció vizsgálata vált lehetségessé az úgynevezett pumpaszondamódszerek segítségével. A pumpaszondamódszerek egyike az attomásodperces csíkozódási technika, ami két lézernyaláb, egy fáziskontrolált néhány ciklusú infravörös (IR) és egy attomásodperces extrém ultravioleta (XUV) lézer egyidejű alkalmazását jelenti a

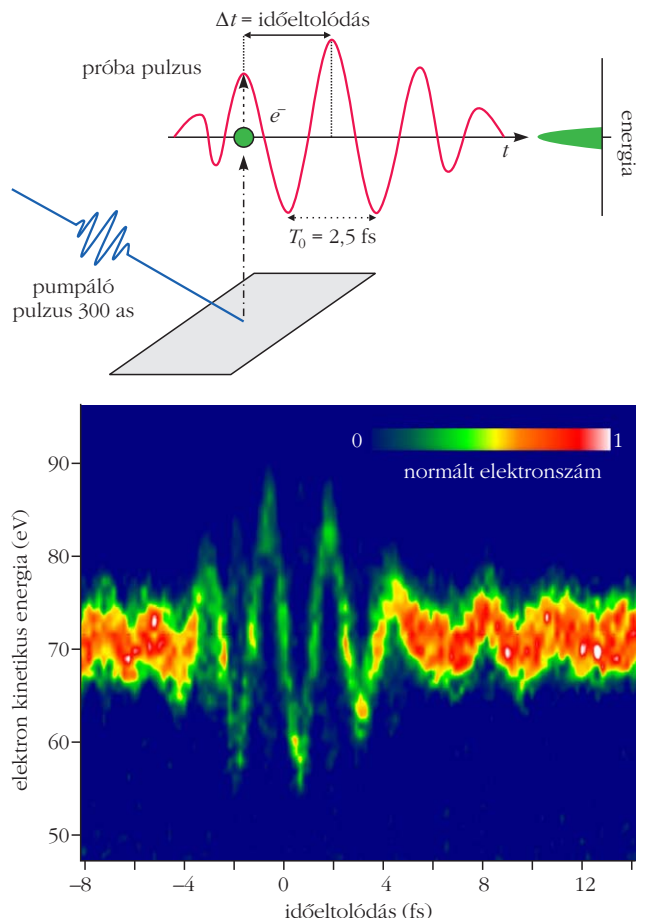
A munkát az ELI-ALPS GOP-1.1.1-12/B-2012-000, GINOP-2.3.6-15-2015-00001, valamint a COST CM1204 (XLIC) és CM1405 (MOLIM) pályázatok támogatták.



Tőkési Károly fizikus, az MTA doktora, tudományos tanácsadó. 1986-tól dolgozik az MTA Atomkiban. 2015-től kapcsolódott be az ELI-ALPS kutatásaiba, a Tudományos Alkalmazások Osztályának munkatársa. Érdeklődése a kísérleti munkáktól az elméleti leírásig terjed. Kutatási területei: atomi ütközések; felületfizika; elektrontranszport-folyamatok szimulációja Monte-Carlo-módszerrel; rövid, intenzív lézerek kölcsönhatásai atomokkal, egyszerű és összetett rendszerekkel; orvosi biológiai alkalmazások.

fotoelektronok szabaddá válásának tanulmányozására. Fotoemisszió szilárdtest-felületekről, amit az ultravioleta energiától a röntgenfoton-energiák alkalmazásáig gerjesztünk egy jól megalapozott diagnosztikai eszköz az elektronikus sávszerkezet, a kristályszerkezet és a kémiai összetétel megismerésére. A standard fotoelektron-spektroszkópiai mérésekben a fotongerjesztés után a mintából kilépő elektronok energiaspektrumát vagyunk képesek megmérni. Arról, hogy az elektron mikor keletkezett, az hogyan mozgott a szilárd mintán belül, nem ad információt, azaz az időinformációt nem hordozza magában. Ezzel szemben, szilárd minták felületéről időfelbontásos fotoemisszió során kilépő elektronok attomásodperces csíkozódási spektrumai [1] – amit először *Cavaliere* és munkatársai [2] honosítottak meg – nem csak a felület közelében lejátszódó elektrondinamika valós idejű megfigyelését teszik lehetővé, ami tipikusan körülbelül 100 as-nak felel meg, hanem igen nagy felületi érzékenységet is

1. ábra. Pumpaszonda attomásodperces csíkozódási spektroszkópia elvi vázlatja.



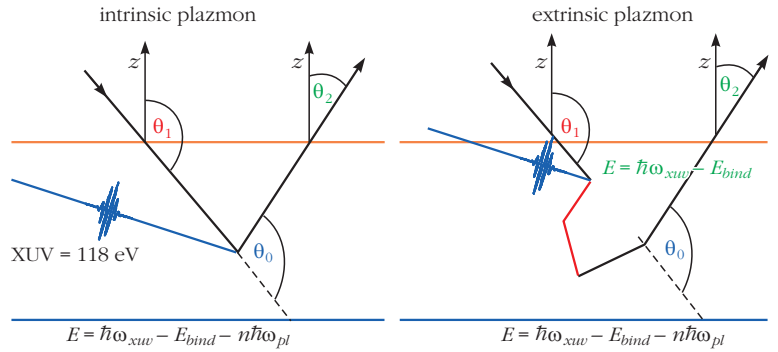
mutatnak, akár néhány Å feloldásban. Ez a példa nélküli tér- és időfelbontás új betekintést ígér a soktest- és korrelációs hatások vizsgálatába.

Az 1. ábra a pumpaszonda attomásodperces csíkozódási spektroszkópia elvi vázlatát mutatja. A pumpáló impulzus igen rövid, tipikusan néhány 100 attomásodperces XUV pulzus, amely a minta pillanatszerű gerjesztését okozza. A szonda-impulzus bizonyos késleltetéssel követi a pumpaimpulzust, ami tipikusan femtomásodperces infravörös impulzus. A fotoelektronok energiaspektrumát, tipikusan néhány száz darab spektrumot mérésenként, a pumpáló és szonda-impulzus közötti időeltolódás (késleltetés) függvényében veszik fel, amelynek eredményeként az 1. ábra alján látható tipikus csíkozódási spektrumot kapjuk.

A lézer-felület kölcsönhatásokban a fotoelektronok különböző (látszólagos) keletkezési idejével kapcsolatos első megfigyelések óta [2] számos tudományos munka jelent meg fotonok által gerjesztett elektronok mintában lejátszódó transzporttulajdonságainak szimulációjára. Amint az elektronemisszió megtörténik, az elektron kölcsönhat az erős, közel infravörös mezővel, amely az elektron külső lézertérben való születésétől függően, azaz a kibocsátási időtől függően a lézer polarizációs irányába változtatja meg annak impulzusmomentumát. A jelenlegi „csíkozódási kísérletek” azt mutatják, hogy a fotoionizáció során kibocsátott elektron kibocsátási ideje függ annak kötési energiájától és kezdeti állapotától. Ez az eredmény a folyamat tiszta klasszikus értelmezése alapján született, elhanyagolva az ionizált célatom hatását. Egy kombinált kvantummechanikai és klasszikus szimulációval megmutatható, hogy a késedelmes fotoemisszió jelentős része közvetlenül kapcsolódik az elektron klasszikus pályájának tulajdonságához, amikor azt egy kombinált Coulomb- és lézertérben határozzuk meg. Ráadásul ezen klasszikus hatáshoz kimutatható a degenerált állapotok kezdeti kvantumos állapotfüggése, amelyet – természetesen – nem lehet klasszikusan reprodukálni. Ez akár az alapállapot-generálás egy művi terméke lehet (l -, m -függő mikrokanonikus eloszlás), de akár a kvantummechanika belső tulajdonsága is lehet.

E munkában egy új pumpaszonda-kísérletet és annak klasszikus alapokon nyugvó leírását mutatom be [3]. A felületekből kilépő fotoelektronok időfelbontásos vizsgálata lehetővé teszi, hogy fémekben a plazmongerjesztéseket is azok valós idejében figyeljük meg. Időfelbontásos fotoemisszió segítségével megkülönböztethetjük a „belső” (intrinsic) és „külső” (extrinsic) plazmonkeltéseket, még akkor is, amikor kezdeti energiaállapotaik degeneráltak. A 2. ábra az intrinsic és extrinsic plazmongerjesztések keletkezésének elvi vázlatát mutatja.

A felületen elnyelt foton energiája vagy teljes egészében átadódhat a szabadabbá váló fotoelektronnak, növelve a spektrum intenzitását a fővonal



2. ábra. Az intrinsic és extrinsic plazmongerjesztések sematikus ábrázolása.

$$E = \hbar \omega_{XUV} - E_{bind}$$

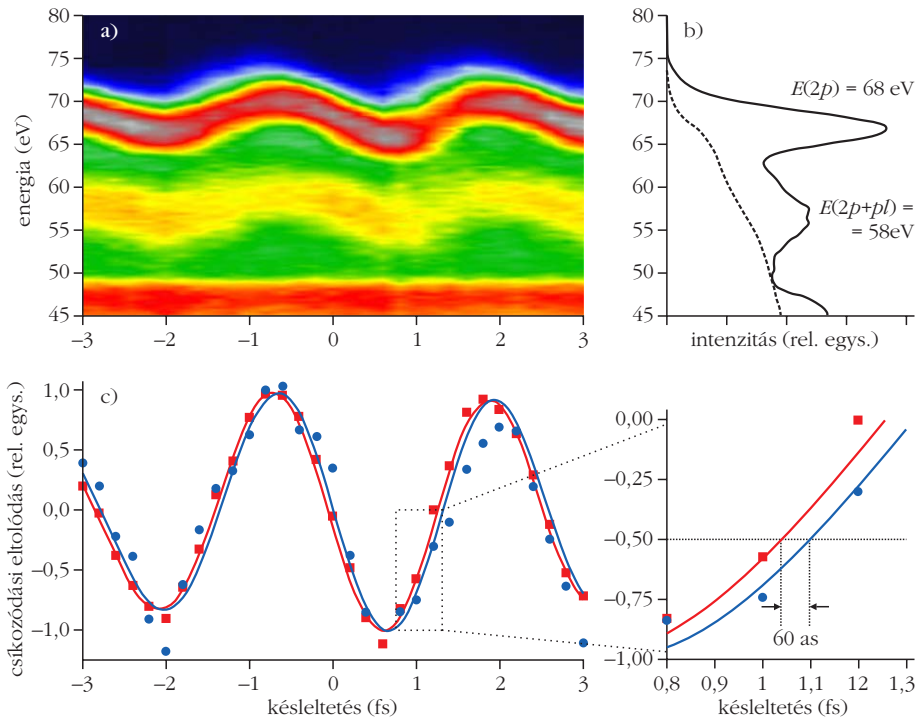
energiájánál, vagy egyidejűleg gerjeszthet n számú „belső”, intrinsic plazmont, amelyek a spektrumban az

$$E = \hbar \omega_{XUV} - E_{bind} - n \hbar \omega_{pl}$$

energiáknál jelennek meg. Ezt a folyamatot – amit atomi fotoionizációban figyeltek meg először – eredetileg *Lundquist* [4] és a *Penn* [5] javasolták, mint egy kondenzált anyagban lejátszódó shake-up szatellit folyamatot [6]. A plazmongerjesztés másik lehetséges útja, ha az nem közvetlenül keletkezik, hanem a fővonal gerjesztése után ezen fotoelektron mintabeli véletlen mozgása során fellépő rugalmatlan ütközés terméke. Ezt a keletkezési utat nevezük „külső” vagy extrinsic plazmongerjesztésnek. Mivel a két folyamatban keletkező elektronok energiája degenerált, ezek megkülönböztetése a standard fotoelektron-spektroszkópiaiban igen nehéz vagy lehetetlen.

A továbbiakban olyan céltárgyat válasszunk, amelynek veszteségi spektruma igen jellegzetes, azaz gyakorlatilag egy jól definiálható erős plazmongerjesztés legyen. Ilyen gerjesztésű spektrummal például a magnézium rendelkezik. Az intrinsic és extrinsic folyamatok karakterisztikus távolságkülönbsége azt sugallja, hogy attomásodperces technikával az intrinsic és extrinsic folyamatokat meg tudjuk különböztetni. Az intrinsic gerjesztés esetében a karakterisztikus hossz a belső lyuk árnyékolt hossza, ami magnéziumban közel 1,5 Å. Extrinsic gerjesztés esetében a karakterisztikus hossz a rugalmatlan ütközés szabad úthossza adja, ami magnézium és néhányszor 10 eV energiánál közel 5 Å.

A pumpaszonda-kísérletet magnézium minta esetében *Neppl* és munkatársai végezték el [7], amelynek során a Mg(0001) felületen a Mg(2p) vonalának gerjesztését (pumpapulzus) 118 eV központi energiájú, lineárisan poláros XUV foton szolgáltatva. A kísérleti eredmények összegzése a 3. ábrán látható. A 4,5 fs hosszú, közel infravörös próba lézerimpulzus kollinearisan volt a pumpáló impulzussal. Megmérték a Mg(2p) belső héjáról gerjesztett fotoelektronok csíkozódási spektrumait, valamint e vonal szatellit vonalát, ami egy plazmont gerjesztett. A magnézium 2p héja-



3. ábra. a) A Mg 2p fotoelektron csúcs- és plazmonvesztéset szenvedett szatellitvonal kísérletileg megfigyelt csíkozódási spektrumai. b) Fotoelektron-spektrum. c) A csíkozódási nyomok relatív eltolódása. A pontok és négyzetek a kísérleti adatok jelzik, míg a folytonos vonalak a legjobb illesztések eredményei. A két vonal közötti eltérés – amit a kinagyított rész mutat – 60 ± 10 as [3].

nak kötési energiája közel 50 eV, míg az egyszeres plazmongerjesztés energiája közel 10 eV. Így a két mérendő csúcs nominális energiaértéke 68 eV és 58 eV. A kirepülő elektronok spektrumát a szondalézerimpulzus modulálja. A moduláció nagyságát a pumpáló és a szondaimpulzus közötti időeltolódás határozza meg, ami impulzuseltolódásban nyilvánul meg. Az impulzuseltolódás nagyságát a

$$\Delta p(\tau) = A(\tau)$$

összefüggés adja. $A(\tau)$ jelöli a lézerpulzus vektorpotenciálját, és τ azt az időpillanatot, amikor a fotoelektron keletkezett és a szondalézer hatással van rá.

A mért spektrumok első momentumát, mint az XUV-NIR késleltetés függvényét elemezve (3.c ábra), a Mg(2p) fő fotoelektron és a plazmonvesztéset szenvedett fővonal között a relatív csíkozódási eltolódásra

$$\Delta \tau_s = \tau[2p + pl] - \tau[2p] = 60 \pm 10 \text{ as}$$

értéket kapunk.

Az intrinsic és extrinsic plazmongerjesztés keletkezési arányának jellemzésére vezessük be az

$$\alpha = \frac{I_0[2p + ipl]}{I_0[2p] + I_0[2p + ipl]} \quad (1)$$

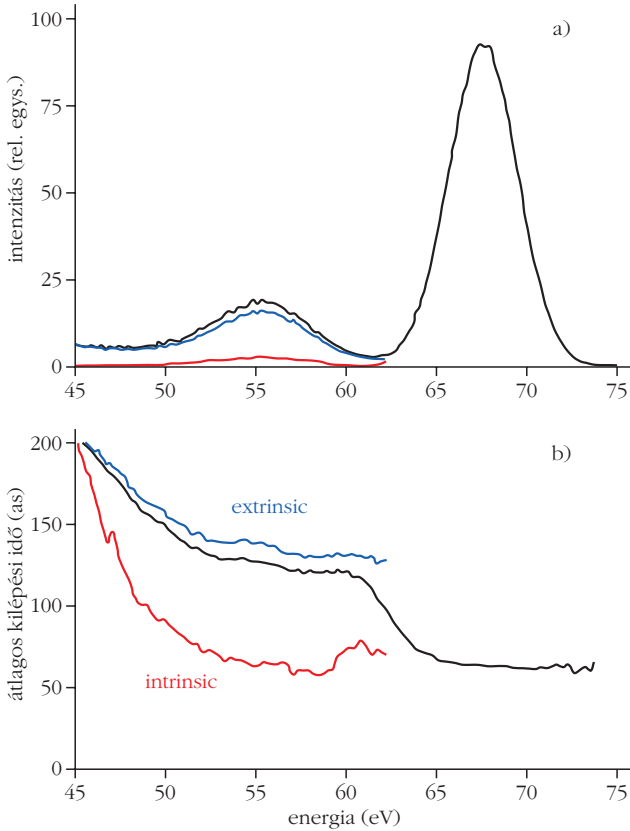
mennyiséget, ahol $I_0[2p + ipl]$ és $I_0[2p]$ a kezdeti foto-gerjesztés intenzitását jelöli intrinsic plazmongerjesztéssel és anélkül. Az α értékének meghatározását célzó korábbi kísérleti és elméleti becslések nagyon széles, 0% és 40% közötti szórást mutatnak.

A csíkozódási spektroszkópiában – szilárd minták esetén – az időinformáció kinyerésének kulcsa a behatolási mélység és a NIR felület közelében mutatott dielektromos árnyékolás angström pontosságú ismerete. Időfüggő sűrűségfüggvény-elmélet segítségével meghatároztuk a polarizációtöltés-réteg keletkezési helyét. Azt kaptuk, hogy az árnyékolt töltés a legfelső atomi rétegtől 3,5 au távolságra helyezkedik el. A NIR árnyékolt távolsága pedig 2,5 au. Így a fotonelnyelés teljesen árnyékolt a szondaimpulzustól. A NIR térnek csak akkor van hatása a fotoelektronra, amikor az kilép a felületből.

A fotoelektron-kilépést a háromlépéses modell segítségével szimuláltuk. A szimulációs lépések a következők: 1) elsődleges fotonelnyelődés, ami a célatom elektronjának

szabaddá válását eredményezi, 2) a szabaddá vált elektron sztochasztikus mozgása a szilárd mintán belül, amikor a rugalmas és rugalmatlan ütközési folyamatokat is figyelembe vesszük, 3) az elektron kilépése a felületből, ami egy diffrakció jellegű szórást jelent a felületi potenciálon. Az elsődleges fotoabszorpciós esemény helyét a legfelső 15 rétegből véletlenszerűen választottuk. A keletkezett elektron mintán belüli véletlen mozgása során egy extrinsic plazmont (epI) gerjeszthet. Ezen elektron véletlen mozgása során kiléphet a felületből és ugyanolyan energiaállapotban találjuk, mint azt az elektront, ami a fotonelnyelődéssel egy időben egy intrinsic plazmont is gerjesztett. Bár a spektrális információból igen nehéz megkülönböztetni a két folyamatból keletkezett elektronokat (4.a ábra), a két keletkezési csatorna különböző átlagos transzport hosszakkal rendelkezik és így különböző időkésleltetéssel is az XUV pulzushoz képest.

Tegyünk egy gyors becslést a csíkozódási időeltolódásra! Ennek érdekében tekintsünk el a rugalmatlan szabad úthossz energiafüggésétől és tegyük fel, hogy a rugalmatlan ütközés következtében mindig egy plazmon keletkezik, azaz hanyagoljuk el minden más rugalmatlan csatorna járulékát. Sztochasztikus ütközésekben az átlagos ütközési hossz – amin belül még nem következik be rugalmatlan ütközés – pontosan a λ_{inel} rugalmatlan szabad úthossz. Ennek értelmében az átlagos elektronrepülési távolság a mintán belül, amikor az elektron egyetlen rugalmatlan ütközést szenved, éppen $2\lambda_{inel}$. Következésképpen – feltételezve, hogy csak extrinsic plazmon keletkezett ($\alpha = 0$) – a



4. ábra. a) Energiaspektrum $\alpha = 0,05$ esetében. b) Az átlagos kiszökési idő eloszlása az intrinsic (piros vonal) és az extrinsic (kék vonal) plazmonkeltési folyamatra [3].

fővonal és az extrinsicplazmon-keltéssel egybekötött vonal közötti várható időeltolódást a

$$\Delta\tau = \frac{\lambda_{inel}}{v} \approx 65 \text{ as}$$

összefüggés segítségével közelíthetjük.

A másik határesetben, amikor α közel 1, az elektronbolyongásból származtatható időkésleltetés eltűnik, és a megmaradó időkésleltetés az Eisenbud–Wigner–Smith (EWS) időkésleltetéssel lesz egyenlő [8]. Ab-initio számításokkal megmutatható, hogy ez az időkésleltetés csak néhány as. Ez az egyszerű becslés igen jó egyezésben van a kísérleti megfigyeléssel (3. ábra).

A szimulált átlagos kiszökési idő eloszlása (4.b ábra) megerősíti ezt az egyszerű analitikai becslést, nevezetesen azok az elektronok, amelyek pályájuk során egy extrinsic plazmont gerjesztenek, $\Delta\tau$ késleltetéssel lépnek ki a felületből azokhoz az elektronokhoz képest, amelyek a keletkezésükkel egy időben vesztenek el egy plazmonnyi energiát (intrinsic plazmon) és a pályájuk során további rugalmatlan ütközést nem szenvednek. A $\Delta\tau_s = \tau[2p+pl] - \tau[2p]$ csikozódási késleltetés – mint az $E[2p+pl]$ elektronok átlagos késleltetése – a következő összefüggés segítségével fejezhető ki:

$$\tau[2p+pl] = \frac{\tau_{ipl} I[2p+ipl] + \tau_{epI} I[2p+epI]}{I[2p+pl]}, \quad (2)$$

ahol $I[2p+ipl]$ és $I[2p+epI]$ a 3.a ábra szerinti parciális energiaveszteségek intenzitásai. A parciális intenzitásokat direkt is származtathatjuk a plazmonvesztéséget szenvedett elektronspektrumból:

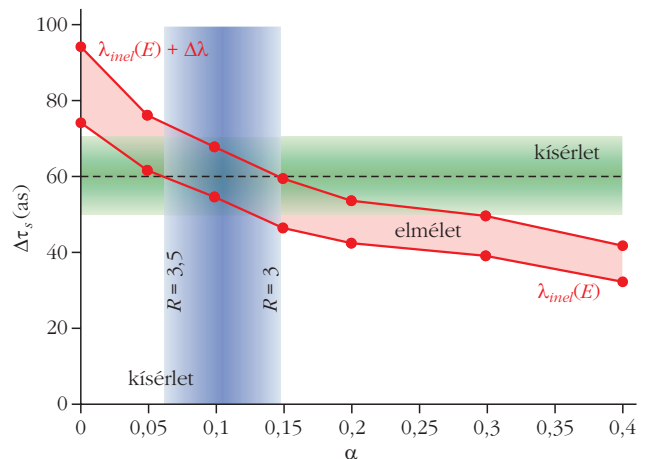
$$R = \frac{I[2p]}{I[2p+pl]} = \frac{I[2p]}{I[2p+epI] + I[2p+ipl]}. \quad (3)$$

A kísérletekből meghatározott R és τ_s értékek segítségével meghatározható az α és az effektív inelasztikus szabad úthossz. R értékének meghatározását igen érzékenyen befolyásolja, hogy a háttérrel miként vonjuk le a spektrumból. Ha a Shirley-típusú háttérrel alkalmazzuk [9], akkor $R \approx 3$ kapunk. Ha azt feltételezzük, hogy a fővonal háttérmentes és csak a plazmonvesztéséget szenvedett csúcsot torzítják a keletkező másodlagos elektronok, akkor R értéke 3,5-re nő. R megengedett értékeinek ezen korlátozása az α megengedett értékeire $0,05 \leq \alpha \leq 0,15$ korlátot szab, ami szintén összhangban van a csikozódási $\Delta\tau_s = 60 \pm 10$ attomásodperccel (5. ábra). Az elméleti τ_s érték, mint az α paraméter függvénye jó egyezést mutat a kísérleti $\tau_s = 60$ as-mal, amikor $\alpha = 0,05$ és a szimuláció során tömbi rugalmatlan szabad úthosszat használunk (5. ábra alsó piros vonala). Azonban a felület közelében a tömbi rugalmatlan úthosszhoz képest – valószínűleg – nagyobb úthosszak szerepelhetnek. A felső piros görbe esetében 1 Å-mel megnöveltük a rugalmatlan szabad úthosszat, ami a tömbi értékhez képest körülbelül 20%-os növekedést jelent. A kísérleti és elméleti eredmények ($\Delta\tau_s$, α) síkon történő összehasonlítása lehetőséget biztosít arra, hogy igen pontosan és egyidejűleg meghatározzuk az intrinsic plazmongerjesztés arányát ($\alpha = 0,1 \pm 0,05$) és a rugalmatlan szabad úthosszat ($\lambda_{inel} = 5,5 \pm 0,5$ Å).

Összefoglalás

Jelen munkában egy új pumpaszonda-kísérletet és annak klasszikus alapokon nyugvó leírását mutattam be. Az időfelbontásos fotoemisszió lehetővé teszi,

5. ábra. A Mg 2p héja fotoemissziós vonalának kísérleti és elméleti összehasonlítása, amikor az – a felületből történő kilépése előtt – vagy intrinsic, vagy extrinsic plazmont is gerjesztett [3].



hogy megkülönböztessük a külső és belső plazmonkeltéseket még akkor is, amikor az energiaállapotok degeneráltak. Egyszerű szabadelektronfém esetében megadtam a külső és belső plazmongerjesztések arányát. Megmutattam, hogy a módszer hatékonyan alkalmazható karakterisztikus transzportúthosszak pontos meghatározására is. A bemutatott módszer azzal kecsegtet, hogy sokkal bonyolultabb és erősen korrelált rendszerek sokelektronos válaszfüggvényét teszteljük fotoemisszióban.

Ezen kutatások nem csak a fizikai alaptudomány bővítéséhez járulnak hozzá, de beláthatatlan távlatokat nyithatnak az alkalmazás területén is. A szegedi ELI az anyagtudomány, az orvostudomány/radiobiológia és számos alkalmazott kutatási területre jelentős hatással lesz. Az attotudomány új technológiák kifejlesztését is ígéri a közeli jövőben, hiszen a végső cél az, hogy ne csak megfigyeljük, hanem ellenőrizzük és befolyásoljuk is az ultragyors mozgásokat. Az attomásodperc és a nanométeres lépték ötvözése új felfedezéseket ígér.

Irodalom

1. R. Kienberger, E. Goulielmakis, M. Uiberacker, A. Baltuska, V. Yakovlev, F. Bammer, A. Scrinzi, T. Westerwalbesloh, U. Kleineberg, U. Heinzmann, M. Drescher, F. Krausz: Atomic transient recorder. *Nature* 427(2004) 817.
2. A. L. Cavalieri, N. Müller, Th. Uphues, V. S. Yakovlev, A. Baltuska, B. Horvath, B. Schmidt, L. Blümel, R. Holzwarth, S. Hendel, M. Drescher, U. Kleineberg, P. M. Echenique, R. Kienberger, F. Krausz, U. Heinzmann: Attosecond spectroscopy in condensed matter. *Nature* 449(2007) 1029.
3. C. Lemell, S. Neppel, G. Wachter, K. Tőkési, R. Ernstorfer, P. Feulner, R. Kienberger, J. Burgdörfer: Real-time observation of collective excitations in photoemission. *Phys. Rev. B* 91(2015) 241101(R).
4. B. I. Lundqvist: Characteristic structure in core electron spectra of metals due to electron-plasmon coupling. *Phys. Kondens. Mater.* 9(1969) 236.
5. D. R. Penn, *Phys. Rev. Lett.* 38(1977) 1429.
6. F. W. Byron, Jr., C. J. Joachain, *Phys. Rev.* 164(1967) 1.
7. S. Neppel, R. Ernstorfer, A. L. Cavalieri, C. Lemell, G. Wachter, E. Magerl, E. M. Bothschafter, M. Jobst, M. Hofstetter, U. Kleineberg, J. V. Barth, D. Menzel, J. Burgdörfer, P. Feulner, F. Krausz, R. Kienberger: Direct observation of electron propagation and dielectric screening on the atomic length scale. *Nature* 517(2015) 342.
8. E. P. Wigner, *Phys. Rev.* 98/1(1955) 145.
9. D. A. Shirley, *Phys. Rev. B* 5(1972) 4709.

A MAGAS FELHARMONIKUSOK KELTÉSÉNEK KVANTUMOPTIKAI LEÍRÁSA

Földi Péter

Szegedi Tudományegyetem Elméleti Fizikai Tanszék
ELI-ALPS Nonprofit Kft., Szeged

A nemlineáris rendszerek közös tulajdonsága, hogy erős, periodikus gerjesztés hatására a dinamika jóval összetettebb az egyszerű harmonikus oszcillációnál. Ez frekvenciaképpen azt jelenti, hogy a rendszert jellemző fizikai mennyiségek spektrumában a ν gerjesztő frekvencia mellett más komponensek is hangsúlyosak. Jellemzően ν egész számú többszörösei, a felharmonikusok jelennek meg. Optikai gerjesztés esetén a másodharmonikus-keltés már évtizedek óta a lézeres technológia egyik jól kidolgozott, alapvető módszere. A magasabb rendű harmonikusok megjelenése azonban nagyon alacsony határfokú folyamat, így kísérleti megfigyelésüket [1–3] a

Az ELI-ALPS projekt (GINOP-2.3.6-15-2015-00001) az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósul meg.



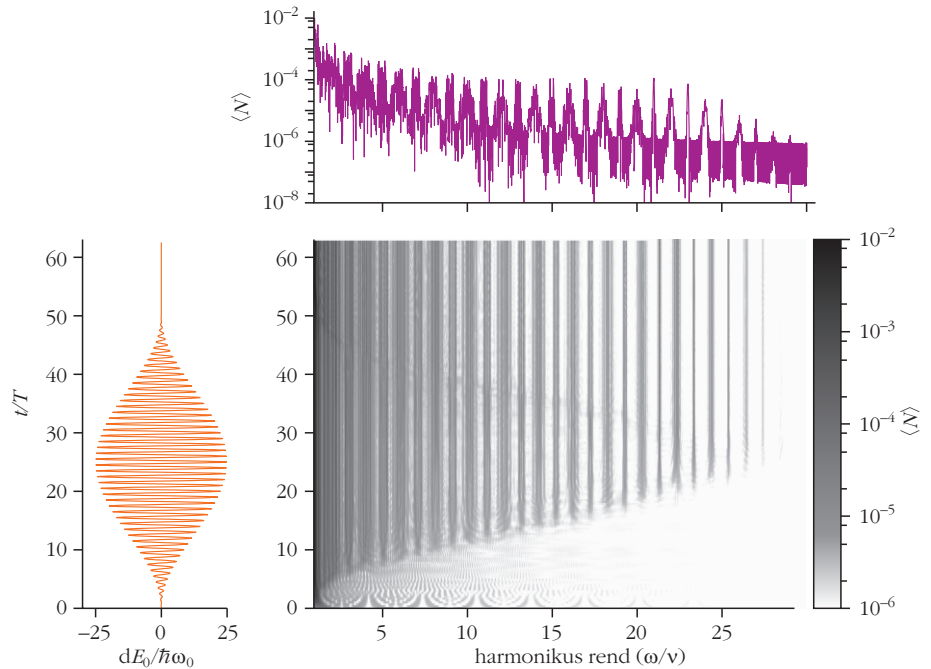
Földi Péter Salgótarjánban született, a József Attila Tudományegyetemen szerzett fizikus és fizikatanár diplomát, majd PhD fokozatot. 2004 óta az SZTE Elméleti Fizikai Tanszékén dolgozik, habilitációja (2011) óta docensként. Vendégkutatóként hosszabb időt töltött az Antwerpeni Egyetemen és a Garching melletti Kvantumoptikai Max Planck Intézetben. 2015 óta az ELI-ALPS részmunkaidős munkatársa. Kutatási területe a fény-anyag kölcsönhatás és a transzportfolyamatok kvantumoptikai leírása.

gerjesztő lézerforrások paramétereinek (elsősorban intenzitásának) fejlődése kellett, hogy megelőzze.

Az optikai magasfelharmonikus-keltés (high-order harmonic generation, HHG) folyamata a fény-anyag kölcsönhatás nagy intenzitású tartományának elvi jelentőségű vizsgálata mellett azért is fontos, mert a gerjesztés hatására az anyagból kilépő másodlagos sugárzás (ami tulajdonképpen a felharmonikusok szuperpozíciója) különleges tulajdonságokkal rendelkezik. Ha az egyes frekvenciákhoz tartozó oszcillációk fázisa nem véletlenszerű, akkor a másodlagos sugárzás a gerjesztés rezgésidejénél lényegesen rövidebb impulzusokat is tartalmaz [4,5]. Közeli infravörös bejövő lézernyaláb esetén ez az attoszekundum nagyságrendjébe eső másodlagos impulzust vagy impulzussorozatot jelent. Ilyen rövid elektromágneses impulzusok például atomi rendszerek dinamikájának korábban elérhetetlen pontosságú feltérképezésére alkalmasak. A szegedi ELI-ALPS elsődleges lézernyalábjai a HHG-n alapuló technológia segítségével attoszekundumos impulzusokat is létre fognak hozni.

A magas felharmonikusokat keltő intenzív lézerterek tipikus térerőssége a GV/m nagyságrendű. Ezen tartományon – a szokásos ökölszabály értelmében – a gerjesztő impulzust elegendő klasszikusan leírni, azaz kvantálás nélkül, pusztán időfüggő külső mezőként kezelünk.

Az erős lézertér magas foton-számot is jelent, amit elhanyagolhatóan változtatnak meg az anyaggal való kölcsönhatás során fellépő abszorpciós/emissziós folyamatok. Mindez azonban nem igaz a kis intenzitású felharmonikusokra, amelyekben, amint azt később látni fogjuk, az átlagos foton-szám az egységnyinél sokkal kisebb. Ennek ellenére a felharmonikus módusok terének kvantált kezelése, a HHG folyamatának a kvantumoptika eszközeit használó leírása még csak jelenleg formálódik. A továbbiakban a témában elért első eredmények közül olvashatunk néhányat, lényegében a [6] alapján.



1. ábra. Nagy panel: a foton-számok várható értéke a hozzájuk tartozó, v egységekben mért frekvencia és az idő függvényében ($T = 2\pi/v$). Bal oldalon a gerjesztő impulzus térerősségének időfüggése látható, a dimenziótlan egység a H_{ext} kölcsönhatás és az atomi nívók energiakülönbségének arányát fejezi ki. A felső ábrán a foton-számok gerjesztés utáni várható értéke látható.

Modell

A jelenség tárgyalásakor ahhoz az 1990-es években gyakran használt modellhez [7–10]

érdeemes visszanyúlni, amely egyetlen, kétállapotú atom kölcsönhatását tekinti a gerjesztő fényvel, és így írja le a HHG folyamatát. Ez több, a kísérletekkel kvalitatív egyezést mutató eredményre vezetett, például segítségével a spektrum jellege is megjósolható. (Gázminták esetén a későbbiekben egy másik, az úgynevezett háromlépcsős modell [11] vált a leggyakrabban alkalmazottá.) Nyilvánvaló, hogy a kétnívós-nak gondolt kvantum részecske nem adhatja vissza a valódi atom dinamikájának gazdagságát (különösen a kontinuum szerepét), ugyanakkor a probléma vizsgálatának szempontjából jó kiindulópontot szolgáltat. (Továbbá szilárdtest-rendszerek esetén – legalábbis egyelektron képben – realiztikusnak tekinthető leírást ad.)

Tekintsünk tehát egy kétnívós „atomot”, amelyet egy erős, klasszikus elektromágneses impulzus gerjeszt. Emellett a gyenge, másodlagos sugárzást írjuk le sok, különböző frekvenciájú kvantált elektromágneses móddal, amelyek kezdetben vákuumállapotban vannak (azaz a hozzájuk tartozó foton-szám nulla). Az elektromágneses terek a dipólmomentum-operátoron keresztül csatolódnak az atomhoz, függetlenül attól, hogy kvantált vagy klasszikus térről van-e szó. A modell fizikai mondanivalója az, hogy az erős lézertér okozta gerjesztés az időfejlődés során „szétoszlik” a kvantált módusokba. A másodlagos sugárzás frekvenciája nem egyezik meg a gerjesztésével, hanem a tér a felharmonikus módusokba is „kiszóródik”. A rendszert leíró Hamilton-operátor matematikailag a következő:

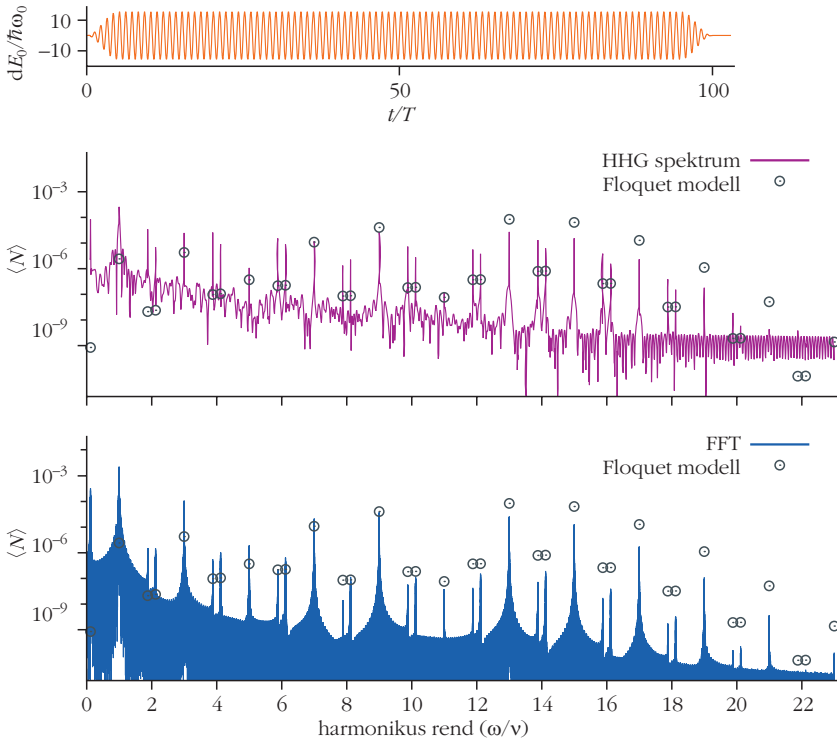
$$H(t) = H_a + H_m + H_{am} + H_{ex}(t), \quad (1)$$

ahol az első tag az ω_0 átmeneti körfrekvenciával jellemzett szabad atomot, a második

$$H_m = \sum_k \hbar\omega_k N_k$$

a szabad kvantált mezőt írja le, ahol az egyes módusok körfrekvenciáját ω_k jelöli, N_k pedig a foton-számoperátor. A gerjesztő $E(t)$, illetve a módusokhoz kapcsolódó E_k terek kölcsönhatása az atommal ($H_{ex}(t)$, illetve H_{am}) teljesen hasonló, dipólmomentum \times térerősség alakú. A gerjesztő tér és az atom kölcsönhatásának erősségét a d dipólmomentum-mátrixelem és a térerősség E_0 amplitúdója határozza meg. A gerjesztő tér a kísérleteknek megfelelően impulzusszerű, az egyszerűség kedvéért egy v körfrekvenciájú (vivőfrekvencia) szinuszhullámot tételezünk fel, amelyet egy véges időablakon kívül az E_0 maximummal rendelkező burkolófüggvénnyel való szorzás tesz nullává. (Egy konkrét példa esetén a térerősség időfüggése az 1. ábra bal oldalán látható.)

Érdeemes megjegyezni, hogy külső tér nélkül ($E(t) = 0$), ha az atom kezdetben gerjesztett, akkor megindul az energiacsere minden egyes módus és az atom között, az $\omega_k - \omega_0$ elhangolás által befolyásolt sebességgel (Rabi-frekvenciával). Ezek a különböző frekvenciájú vákuum Rabi-oszcillációk (amelyek az atomon keresztül enyhén össze is csatolódnak), azt eredményezik, hogy az atom fokozatosan megközelíti alapállapotát. A folyamat tehát a spontán emisszió egy igen egyszerű modellje. Természetesen, mivel a numerikus számításokban csak véges sok módust (≈ 1000) tudunk figyelembe venni, a dinamikában megjelenő véges sok frekvenciájú oszcilláció egy idő után ismét



2. ábra. A középső panel megegyezik az 1. ábra legfelső részével, de most a gerjesztő impulzus időfüggése más, ez látható a legfelső görbén. Az alsó panelen a dipólmomentum-operátor várható értékének időfüggéséből számolható intenzitáspektrum látható, ugyan-ezen gerjesztés esetére. A körök mindkét esetben a Floquet-módszer segítségével kapott válaszok egy olyan monokromatikus külső térre, amelynek amplitúdója megegyezik a legfelső görbe maximumával.

fázisba kerül, így az atom nem marad örökké az alapállapotban („feléledés”). Ez a jelenség korlátot szab arra az időintervallumra, amíg a modellt megbízhatóan alkalmazhatjuk. Realisztikus paraméterek használata esetén a dinamikailag érdekes tartomány (ami a lézertimpulzus tovahaladásáig tart) rövidebb, mint az említett feléledés időállandója.

Eredmények

A lézerteret bekapcsolva az 1. ábrán látható eredményt kapjuk, ahol a középső panelen az idő és a frekvencia függvényében az egyes módusokhoz tartozó fotonszámok várható értékét láthatjuk. A lézertér időbeli lefutását az ábra bal oldali része mutatja, míg a felső panelen a fotonszám várható értékeket láthatjuk a lézertimpulzus tovaterjedése után. Mind itt, mind a középső panel színekódolásában logaritmikus skálázást alkalmaztunk, amire azért van szükség, mert a fotonszámok közelítőleg hat nagyságrendnyi tartományon változnak. A maximum egyértelműen a gerjesztő frekvencia környékén található, azután közel azonos magasságú csúcsok sorozata következik („plató”), majd a felharmonikus csúcsok eltűnnek („levágás”). A kísérletekben mért HHG spektrumok hasonló jellegű szakaszokra bonthatók, mind gáz- [1–3], mind pedig szilárdtest-minta [12–14] esetén. A levágáshoz tartozó frekvencia analitikusan is becsülhető [9], és fizikailag azzal az energiával arányos, amit a HHG egy elemi

folyamata során egyetlen elektron maximálisan nyerhet. Mielőtt a fotonszámok dinamikáját elemeznénk, érdemes összevetni a lézertimpulzus távoztása után kapott fotonszám várható értékeket a szokásos módon kapható intenzitáspektrummal, amelyet a dipólmomentum-operátor (gyorsulással arányos) második idő-deriváltjából Fourier-transzformáció segítségével nyerhetünk. A 2. ábrán a lila és a kék görbe a két módszerrel kapott spektrumokat mutatja, a legfelső ábrán látható gerjesztés esetére. E külső térerősség amplitúdója egy rövid felfutó szakasz után konstanssá válik, ami azért érdekes, mert állandó amplitúdó esetén (ami végtelen, monokromatikus gerjesztést jelent) a kétnívós atom problémája könnyen kezelhető az időben periodikus rendszerekre kidolgozott Floquet-módszer segítségével [15]. Ekkor kapjuk a 2. ábrán körökkel jelölt pontokat, amelyek magassága ugyan eltér a véges hosszúságú gerjesztéshez kapcsolódó eredményektől, a hozzájuk tartozó frekvenciák azonban lényegében megegyeznek a HHG csúcsokéival.

A fotonszámok várható értékének dinamikájára visszatérve, az 1. ábrán látható, hogy a lézertimpulzus megérkezését egy rövid tranziens időszak követi, azután a fotonszám nőni kezd a felharmonikus módusokban, először az alacsonyabb frekvenciákhoz tartozókban, majd a magasabbakhoz tartozókban is. A levágás frekvenciájához tartozó módus fotonszáma lényegében az impulzus burkolójának maximuma környékén válik észrevehetővé.

Az átlagos fotonzámon túl további érdekes kérdés, hogy az egyes felharmonikus módusokban milyen a fotonok statisztikája. Egy konkrét, mondjuk a k -edik módus esetén ez a legrészletesebben az egyes (egész) n fotonszámokhoz tartozó $P_n^{(k)}$ valószínűségek megadásával lehetséges.

Ezzel a jelöléssel a fotonszám várható érték a k -edik módusban

$$\langle N_k \rangle = \sum_n n P_n^{(k)}$$

alakban írható, a szórásnégyzetet pedig az alábbi módon fejezhetjük ki:

$$(\Delta N_k)^2 = \sum_n n^2 P_n^{(k)} - \langle N_k \rangle^2.$$

Az összes $P_n^{(k)}$ megadásánál ugyan globálisabb képet ad, de igen hasznos a fotonszámok várható értékének és szórásának viszonya is. A viszonyítási alap legtöbbször a lézertforrások által természetes módon létrehozott koherens állapot, amely esetében a P_n valószínűs-

gek Poisson-statisztikát követnek, α paraméterrel jellemzett koherens állapot esetén

$$P_n(\alpha) = \exp(-|\alpha|^2) \frac{|\alpha|^{2n}}{n!}.$$

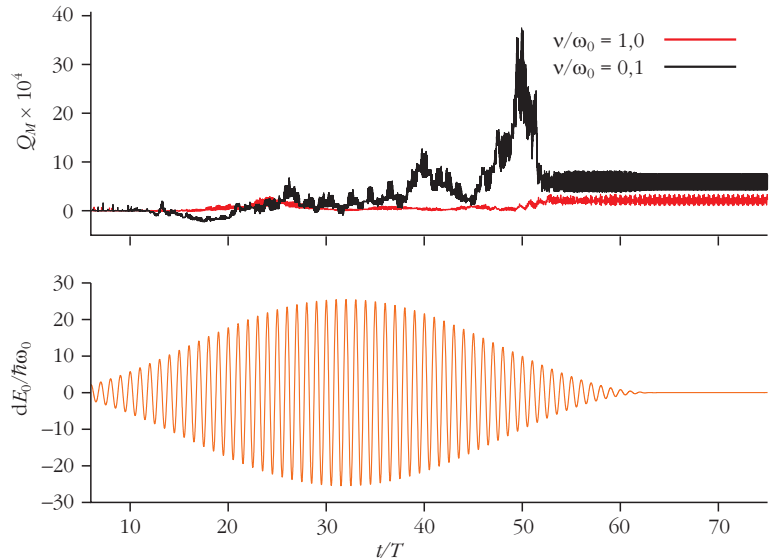
(Az egyszerűség kedvéért itt és a továbbiakban a k módusindexet nem írjuk ki.) Ennél természetesen „élesebb” (szub-Poisson) és „szélesebb” (szuper-Poisson) eloszlások is előfordulhatnak, az előbbi esetre példa az az állapot, amelyben pusztán egyetlen, nemnulla fotonszám valószínűsége nem tűnik el – és így szükségképpen egységnyi. Szuper-Poisson eloszlással rendelkezik például a hőmérsékleti sugárzás. E tulajdonság leírására használatos a

$$Q_M = \frac{(\Delta N)^2}{\langle N \rangle} - 1 \quad (2)$$

Mandel-paraméter [16], amely koherens állapotokra eltűnik, szub-, illetve szuper-Poisson eloszlás esetén pedig rendre negatív, illetve pozitív, így könnyen kezelhető, számszerű jellemzést ad. Esetünkben, mivel $\langle N \rangle$ kicsiny, annak van a legnagyobb valószínűsége (közel 100%), hogy egyáltalán nincs foton a módusban. A nemnulla fotonszámok ennél jóval kisebb súllyal (10^{-4} – 10^{-6} valószínűséggel) vannak jelen a módusok állapotában. Ez a tulajdonság azt is jelenti (3. ábra), hogy a Mandel-paraméter nagyon kis értékeket vesz fel. Ugyanakkor az általunk vizsgált összes numerikus paraméter eseteire általánosan érvényes állításokat fogalmazhatunk meg. Arra a kérdésre, hogy milyen jellegű a felharmonikus módusok fotonstatisztikája, modellünk alapján a válasz az, hogy szuper-poissoni: a Mandel-paraméter – a kezdeti, tranziens szakaszt leszámítva – az időfejlődés folyamán mindig pozitív és a gerjesztés megszűntével is pozitív marad. Más szóval, a felharmonikus módusok nagyon közel vannak a foton nélküli vákuumállapothoz, az igen alacsony valószínűséggel megjelenő nemnulla fotonszámok eloszlása pedig szélesebb a referenciaként szolgáló koherens állapotokénál.

Összefoglalás

A magasfelharmonikus-keltés folyamata során a felharmonikus sugárzás intenzitása igen alacsony, kvantumoptikai értelemben ezek a módusok nagyon kevés foton tartalmazznak. Egy jól átlátható modell segítségével a fotonszámok dinamikája követhető ezekben a módusokban, és a gerjesztés után az egyes módusokhoz tartozó fotonszám várható értékek a klaszikus HHG spektrumhoz nagyon hasonló eloszlást mutatnak, jellegzetes HHG csúcsokkal. Egyetlen módus statisztikája pedig enyhén szuper-Poisson eloszlást követ.



3. ábra. A (2) egyenlettel adott Mandel-paraméter időfüggése a 8. felharmonikus frekvencián ($\omega = 8\nu$). A fekete görbe az atomi átmenettel rezonáns gerjesztéshez tartozik ($\nu = \omega_0$), a piros pedig az erősen elhanyagolt esetet írja le ($\nu = \omega_0/10$). Alul a gerjesztő impulzus időfüggése látható.

Irodalom

1. M. Ferray, A. L’Huillier, X. F. Li, L. A. Lompre, G. Mainfray, C. Manus: Multiple-harmonic conversion of 1064 nm radiation in rare gases. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 21 (1988) L31.
2. A. L’Huillier, Ph. Balcou: High-order harmonic generation in rare gases with a 1-ps 1053-nm laser. *Phys. Rev. Lett.* 70 (1993) 774–777.
3. C.-G. Wahlström, J. Larsson, A. Persson, T. Starczewski, S. Svanberg, P. Salières, Ph. Balcou, A. L’Huillier: High-order harmonic generation in rare gases with an intense short-pulse laser. *Phys. Rev. A* 48 (1993) 4709–4720.
4. G. Farkas, C. Tóth: Proposal for attosecond light pulse generation using laser induced multiple-harmonic conversion processes in rare gases. *Physics Letters A* 168 (1992) 447–450.
5. F. Krausz, M. Ivanov: Attosecond physics. *Rev. Mod. Phys.* 81 (2009) 163–234.
6. Á. Gombkötő, A. Czirják, S. Varró, P. Földi: Quantum-optical model for the dynamics of high-order-harmonic generation. *Phys. Rev. A* 94 (2016) 013853.
7. A. E. Kaplan, P. L. Shkolnikov: Superdressed two-level atom: Very high harmonic generation and multiresonances. *Phys. Rev. A* 49 (1994) 1275–1280.
8. R. Burlon, G. Ferrante, C. Leone, P. A. Oleinikov, V. T. Platonenko: Modeling harmonic generation by a degenerate two-level atom. *J. Opt. Soc. Am. B* 13 (1996) 162–169.
9. F. I. Gauthey, B. M. Garraway, P. L. Knight: High harmonic generation and periodic level crossings. *Phys. Rev. A* 56 (1997) 3093–3096.
10. A. Di Piazza, E. Fiordilino, M. H. Mittleman: Analytical study of the spectrum emitted by a two-level atom driven by a strong laser pulse. *Phys. Rev. A* 64 (2001) 013414.
11. P. B. Corkum: Plasma perspective on strong field multiphoton ionization. *Phys. Rev. Lett.* 71 (1993) 1994–1997.
12. S. Ghimire, A. D. DiChiara, E. Sistrunk, P. Agostini, L. F. DiMauro, D. A. Reis: Observation of high-order harmonic generation in a bulk crystal. *Nat. Phys.* 7 (2011) 138–141.
13. S. Ghimire, G. Ndabashimiye, A. D. DiChiara, E. Sistrunk, M. I. Stockman, P. Agostini, L. F. DiMauro, D. A. Reis: Strong-field and attosecond physics in solids. *J. Phys. B* 47 (2014) 204030.
14. G. Ndabashimiye, S. Ghimire, M. Wu, D. A. Browne, K. J. Schaffer, M. B. Gaarde, D. A. Reis: Solid-state harmonics beyond the atomic limit. *Nature* 534 (2016) 520.
15. G. Floquet: Sur les équations différentielles linéaires à coefficients périodiques. *Ann. École Norm. Sup.* 12 (1883) 46–88.
16. L. Mandel: Sub-Poissonian photon statistics in resonance fluorescence. *Opt. Lett.* 4 (1979) 205.

ÚTBAN AZ ELI FELÉ: FEMTOSZEKUNDUM IDŐFELBONTÁSÚ FLUORESZCENCIASPEKTROSKÓPIA EGY KOENZIM-MOLEKULÁN

Groma Géza

MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpont, Biofizikai Intézet

A szegedi ELI-ALPS lézerközpont [1] 2017 ősztől megkezdte a teszüzemben folyó működését, amely speciálisan e célra tervezett, 5-10 fs (1 fs = 10^{-15} s) időtartamú, nagy energiájú impulzusokat keltő lézerek telepítésével kezdődik. Ezek a primer fényforrások azután további, másodlagos fényforrások, elsősorban attoszekundumos impulzusok keltését teszik lehetővé. A fokozatosan kiépülő, meglehetősen komplex rendszer a már hagyományos és az újonnan születő ultragyors spektroszkópiai módszerek rendkívül széles arzenáljának alkalmazására ad lehetőséget. Természetes módon merül fel a kérdés, hogy a hazai kutatói társadalom miképpen lesz képes élni ezekkel a soha nem látott technikai lehetőségekkel.

Nyilvánvalóan, ahogy a járművezetés tanulását sem Forma-1 autókon, úgy a nagy időfelbontású spektroszkópia elsajátítását sem az ELI-ben kell elkezdni. Más szóval, elsősorban azok a kutatóegységek lesznek képesek az ELI-ben lefolytatandó kísérleteiket hatékonyan megtervezni és végrehajtani, amelyek már maguk is rendelkeznek valamilyen ultragyors spektroszkópiai infrastruktúrával, és kutatóik kellő tapasztalatot gyűjtöttek ebben a technikában. Az alábbiakban egy konkrét kísérletsorozat kapcsán azt szeretném bemutatni, hogy a Szegedi Biológiai Központ Biofizikai Intézete milyen „interfészt” épített ki az ELI felé.

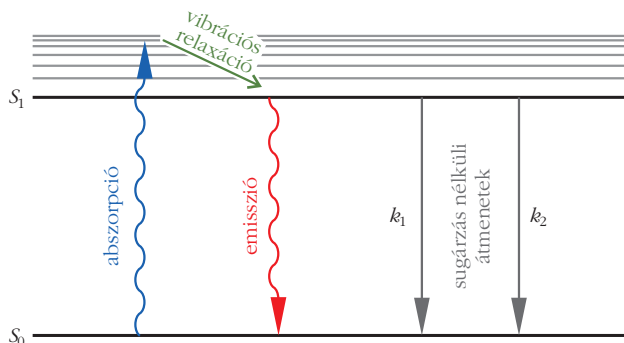
Időfelbontásos fluoreszcenciaspektroszkópia: miért?

Az időfelbontásos fluoreszcenciaspektroszkópiai mérések során a vizsgálandó molekula gerjesztett állapotának időbeli lecsengését (kinetikáját) követjük az

A bemutatott mérőberendezés felépítésében, a kísérletek elvégzésében és kiértékelésében a Biofizikai Intézet Femtobiológiai Kutatócsoportjának korábbi és jelenlegi tagjai, *Makai András*, *Heiner Zsuzsanna*, *Sarlós Ferenc*, *Sipos Áron* és *Nagypál Rita* vettek részt. A Hofmeister-effektus tanulmányozásában *Dér András* működött közre.



Groma Géza 1952-ben született, fizikus diplomáját 1977-ben a szegedi József Attila Tudományegyetemen, kandidátusi fokozatát 1996-ban az MTA-n szerezte. 1977 óta a Szegedi Biológiai Kutatóközpont Biofizikai Intézetének kutatója, fehérjék és egyéb biomolekulák fotoreakcióinak kinetikáit tanulmányozza és modellezi. A 2000-es évek óta elsősorban ultragyors jelenségekkel foglalkozik, a Femtobiológiai Kutatócsoport vezetője.



1. ábra. Egy fluoreszkáló molekula egyszerűsített Jablonski-diagramja.

emittált fotonok detektálásával. Érdekes módon, az ilyen jellegű vizsgálatok során maga az emissziós folyamat ritkán érdekel bennünket. Ellenkezőleg, általában éppen a gerjesztett állapotból kiinduló sugárzás nélküli folyamatokra vagyunk kíváncsiak.

A sugárzásos és nem sugárzásos folyamatok kapcsolata az 1. ábrán látható Jablonski-diagram [2] alapján érthető meg. Az egyszerűség kedvéért az ábrán csak a számunkra most fontos átmeneteket mutatjuk be. Az abszorpciós folyamat a molekulát elektronikusan és vibrációsan is gerjesztett állapotba juttatja. A vibrációs relaxáció időállandója jellegzetesen a ps körüli tartományba esik, tehát az ennél általában lassabb fluoreszcenciaemissziós folyamat nagyrészt már a vibrációs alapállapotból indul ki. Ezzel párhuzamosan a gerjesztett állapot különböző sugárzás nélküli átmenetek során is az alapállapotba kerülhet, az ábrán ezekből kettőt tüntettünk fel. Nyilvánvaló, hogy az S_1 gerjesztett állapot kiürüléséhez vezető folyamatok sebességi állandói összeadódnak. Így az ábra jelöléseivel a relaxáció folyamata (némi egyszerűsítéssel) a

$$\frac{dS_1(t)}{dt} = -\left(\Gamma + \sum_{i=1}^m k_i\right) S_1(t) \quad (1)$$

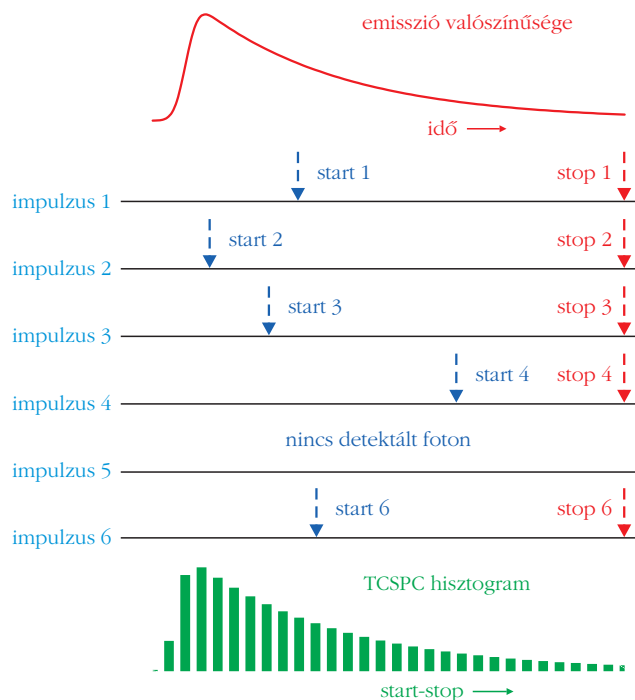
differenciálegyenlettel írható le, ahol m a sugárzás nélküli átmenetek száma. Ennek megoldása a

$$\tau = \frac{1}{\Gamma + \sum_{i=1}^m k_i}$$

időállandóval kifejezve

$$S_1(t) = n_a e^{-\frac{t}{\tau}}, \quad (2)$$

ahol n_a az abszorbeált fotonok száma. Ennek megfe-



2. ábra. A TCSPC módszer sémája.

elően a sugárzásos átmenetből származó fluoreszcenciaintenzitás kinetikája

$$I(t) = \Gamma S_1(t) = \Gamma n_a e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (3)$$

Látható tehát, hogy a fluoreszcenciakinetika-mérésből meghatározható élettideben csatoltan jelennek meg a különböző átmenetek sebességi állandói. Megjegyzendő, ha kísérletileg meghatározzuk az emisszió kvantumhatásfokát is, akkor Γ és $\sum_{i=1}^m k_i$ értéke külön-külön meghatározható, az egyedi k_i értékek azonban nem. Az ezekhez tartozó sugárzás nélküli átmenetek a molekula fluoreszkáló csoportja (kromofórja) és annak mikroörnyezete közötti kölcsönhatások során jönnek létre. Ilyenek például az oldószer- és egyéb szomszédos molekulák, vagy akár a kromofór és a molekula saját másik csoportja közötti különböző típusú kapcsolatok. Izolált molekulák esetén m és az egyes k_i értékek is nyilvánvalóan kicsik, ennek megfelelően τ értéke jellegzetesen néhány ns. Azonban erős környezeti kölcsönhatások eredményeként ez az érték akár a szubpikoszekundumos tartományba is kerülhet. Mindez azt jelenti, hogy az időfelbontásos fluoreszcenciaspektroszkópia kiválóan alkalmas a kromofór környezetében lejátszódó szerkezeti változások érzékeny monitorizálására.

Időfelbontásos fluoreszcenciaspektroszkópia: hogyan?

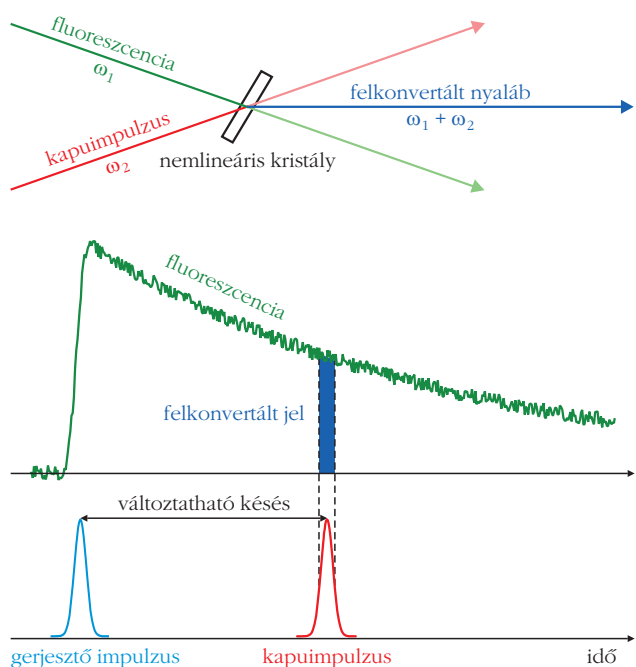
A fluoreszcenciakinetikák követésére többféle kísérleti módszer létezik, az alábbiakban két gyakran alkalmazott eljárást ismertetek, amelyeket laboratóriumunkban is alkalmazunk. Mindkettő úgynevezett

soklövéses technikán alapul, azaz a kinetikák nagyszámú lézerimpulzus általi ismételt gerjesztések eredményeképpen mérhetők.

Amennyiben a megkívánt időfelbontás nem túl nagy, a legkézenfekvőbb az időkorrelált egyfoton-számlálás (time correlated single photon counting, TCSPC) alkalmazása (2. ábra). A módszer lényegében a fluoreszcenciakinetika valószínűségelméleti definícióján alapul, amely ahhoz az eseményhez tartozó sűrűségfüggvény, amely során a gerjesztést követően az első fluoreszcenciafoton egy adott időpillanatban emittálódik. A kísérletek végzésekor tehát biztosítani kell, hogy minden gerjesztő lézerimpulzus után a detektor (fotoelektron-sokszorozó, lavina-fotodióda stb.) maximum egy fotont detektáljon, ami egy elektromos *start* jelet generál. Egy másik detektor magából a lézerimpulzusból hoz létre egy *stop* jelet, amely egy késleltetés eredményeképpen mindig a *start* után keletkezik. (A fordított időbeliség biztosítja a működőképességet akkor is, ha egy gerjesztés után egyetlen foton sem detektálódik.) A két jelet egy idő-amplitúdó konverterbe vezetjük, amelynek kimeneti feszültsége arányos a köztük eltelt idővel. Kellően nagyszámú ismétlés után az ezen értékekből készített hisztogram azonos lesz a fluoreszcencialecsengési görbével. A TCSPC eljárás – elveiből következően – rendkívül érzékeny, technikailag egyszerű és olcsó, a módszerrel jelenleg elérhető legjobb időfelbontás 20 ps.

Amennyiben a fluoreszcenciakinetikák ultragyors komponenseit is vizsgálni kívánjuk, az idő mérése elektronikusan már nem oldható meg. Olyan „órászerkezetet” kell alkalmaznunk, amely tisztán optikai elveken működik. Egy ilyen eljárás a fluoreszcenciafelkonvertálás (upconversion) módszere (3. ábra). Ennek során a fluoreszcenciafényt és a gerjesztő lézerről kicsatolt kapuimpulzusokat tartalmazó nyaláb

3. ábra. A fluoreszcenciafelkonvertálás módszerének sémája.



bot egy nemlineáris kristályra fókuszáljuk. A kristályból ekkor egy olyan nyaláb is kilép, amelyhez tartozó elektromos térerősség a belépő érték négyzetével arányos. Ha a fluoreszcenciafény, illetve a kapuimpulzus egy-egy spektrális komponense ω_1 és ω_2 körfrekvenciákkal jellemezhető, akkor a kilépő fény térerőssége az

$$\left[E_1 \cos(\omega_1 t + \varphi_1) + E_2 \cos(\omega_2 t + \varphi_2) \right]^2 \quad (4)$$

mennyiséggel lesz arányos. Elemi trigonometriai átalakításokkal belátható, hogy a fenti formula hat tag összegére bontható, amelyek rendre $2\omega_1$, $2\omega_2$ (frekvenciakettőzés), 0 , 0 (optikai egyenirányítás) $\omega_1 + \omega_2$ (felkonvertálás) és $\omega_1 - \omega_2$ (lekonvertálás) körfrekvenciákkal írhatók le. Számunkra a két utolsó tag érdekes, az adott spektrális tartományoktól függ, hogy kísérletileg melyiket érdemes detektálni.

A továbbiakban a felkonvertálásra szorítkozunk, ez az optikai jel csak akkor jön létre, ha a két bemenő jel térben és időben is átfed, nagysága pedig az átfedési integrállal lesz arányos. Tehát, ha detektáljuk a felkonvertált nyalábban fellépő impulzusok energiáját, miközben a kapuimpulzus időbeli helyzetét optikai késleltetéssel változtatjuk, akkor rekonstruálni tudjuk a fluoreszcenciakinetikát. A detektálás jellegzetesen egy spektrográf kimenetén elhelyezett CCD-tömbbel történik, ami egyúttal a fluoreszcencia spektrális felbontását is biztosítja. Ehhez azonban – az impulzus megmaradását biztosító fázisillesztési kényszer kielégítése érdekében – a nemlineáris kristály szögét folyamatosan változtatnunk kell.

A fluoreszcenciafelkonvertálás módszerével már 50 fs körüli időfelbontást is elértek. Ezen impozáns értéknek azonban nagy ára van: az eljárás érzékenysége körülbelül három nagyságrenddel kisebb, mint a TCSPC módszeré. Ennek következtében a megfelelő jel/zaj érték eléréséhez gyakran igen hosszú detektálási idő szükséges. Ezen kívül a megfelelő optikai összeállítás bonyolult, költséges, üzemeltetéséhez gyakori, igen precíz beállítás szükséges, ami nagy tapasztalattal és türelemmel rendelkező kutatókat igényel.

A Biofizikai Intézetben a közelmúltban egy olyan kombinált mérőberendezést építettünk fel, amely ötvözi a fent ismertetett két mérési technikát. Ha gyors komponenseket kívánunk mérni, azt a 150 fs időfelbontású felkonvertáló elrendezéssel tesszük. A lassabb folyamatok a lényegesen egyszerűbb és kevésbé időigényes TCSPC technikával mérhetők. A két módszer között – flexibilis tükrökkel, néhány perc alatt – ide-oda tudunk kapcsolni. Ez lehetővé teszi, hogy akár egy mintán is alkalmazzuk mindkét technikát, majd a kapott görbéket 200 ps környékén összeillesztjük (lásd az 5. ábra belső grafikóját). Ezáltal a teljes mérési időtartomány 50 fs – 10 ns, lineáris vagy logaritmusos léptékben. A gerjesztés 70 fs-os lézerművel a 345–520 nm vagy 690–1040 nm, a detektálás a 200–1000 nm tartományban lehetséges. A mérés körülbelül 1 ml folyadékfázisú mintát igényel.

Biológiai objektum = heterogenitás

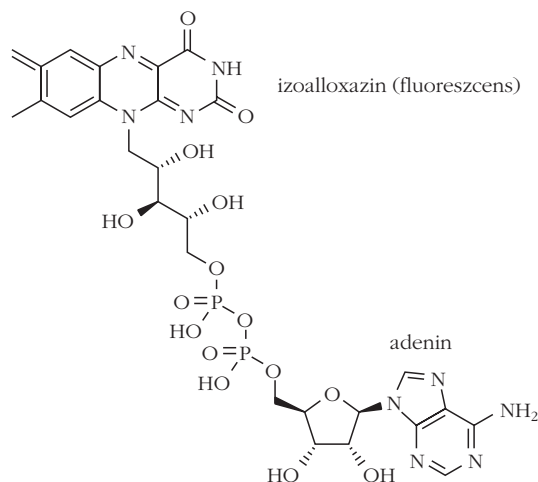
A fentiekben láttuk, hogy az egyetlen gerjesztett állapottal és homogén mikrokörnyezettel rendelkező kromofórok esetén a lecsengési kinetika egyetlen exponenciális időállandóval jellemezhető, függetlenül attól, hogy hány sugárzás nélküli átmenet lép fel benne. Az ilyen idealizált rendszer mikrokörnyezetében bekövetkező változások követéséhez valójában nincs is szükség az időfelbontásos módszerekre. A hagyományos egyensúlyi fluoreszcenciaspektroszkópia ugyanis a kinetika időbeli határozott integráltjával arányos jelet mér, tehát a változó időállandó a változó jel nagyság segítségével pontosan követhető. Valóban, a spektroszkópia klasszikus korszakában számos értékes tanulmány született ezen az elven. A problémát az okozza (és teszi egyben izgalmassá), hogy ténylegesen homogén rendszerek a valóságban ritkán léteznek. Triviális módon bonyolultabbá válik a helyzet, ha a lecsengési folyamatban több gerjesztett állapot vesz részt, a mintában több kromofór található, vagy például egy kromofór monomer és dimer állapotban is jelen van. A biológiai rendszereknek pedig egyenesen alapvető tulajdonságuk a heterogenitás. Ilyen rendszerekben a kromofór lehet

- különböző redox állapotban,
 - különböző pH-értékű mikrokörnyezetben,
 - szabad vagy fehérjéhez kötött,
 - különböző konformációs állapotú fehérjemolekulához kötött,
 - többféle fehérjéhez vagy membránhoz kötött,
 - rezonáns energiaátadásban (FRET) résztvevő,
- különböző donor-akceptor távolságok mellett.

Az alábbiakban egy konkrét példán bemutatjuk, hogy egy igen kis méretű biomolekula egyszerű vizes oldatban is milyen összetett fluoreszcenciakinetikával rendelkezhet.

A flavin-adenin-dinukleotid (FAD) egy koenzim (enzimekhez lazán kapcsolódó funkcionális molekula), amely alapvető szerepet játszik az élő szervezetek redox reakcióiban. A molekula kromofórja az izoalloxazin csoport (4. ábra), amely oxidált állapot-

4. ábra. Az FAD koenzim szerkezete.



ban 450 nm-es abszorpció és 530 nm-es emisszió csúccsal rendelkezik. Régóta ismeretes, hogy az FAD fluoreszcencia-életideje erősen függ az izoalloxazin- és az adenincsoportok közötti kölcsönhatástól. Az ábrán látható nyílt konformációs állapotban a két csoport távol van egymástól, az adenin nem lép kölcsönhatásba az izoalloxazinnal, így az ahhoz tartozó gerjesztett állapot életideje ~3 ns. Vizes közegben azonban a molekula elsősorban összehajtott (zárt) konformációt vesz fel. Ebben a szerkezeti formában a gerjesztett izoalloxazin feltehetően átvesz egy elektront az adenintől, amely az élettartam jelentős csökkenéséhez vezet [3]. Bár a jelenséget többen tanulmányozták az ultragyors fluoreszcenciaspektroszkópia módszerével [4], ezek a vizsgálatok általában egy-egy aránylag szűk időablakban készültek, különböző életidőket eredményeztek, és nem adtak lehetőséget átfogó analízisre.

Az előző fejezetben ismertetett hibrid mérőberendezés lehetőséget nyújtott arra, hogy az FAD fluoreszcenciakinetikáját különböző oldatokban széles idő- és spektrális tartományban jellemezzük. A vizes oldatban pH = 7,0 értéknél mért kinetikákat az 5. ábrán tüntettük fel. Ha a vizet olyan oldószerekkel (etanol, dioxán, DMSO) elegyítettük, amelyekről ismeretes volt, hogy elősegítik a nyílt konformációjú állapotok populációját, a várakozásnak megfelelően a lecsengési kinetika jelentősen lelassult. Ilyen esetekben az feltételezhető, hogy a heterogén konformációs állapot legalább két komponensű fluoreszcencialecsengést eredményez. Mint azt a következő fejezetben látni fogjuk, az ilyen kinetikák elemzése azonban korántsem triviális feladat.

Komplex kinetikák analízise, egy klasszikus kihívás

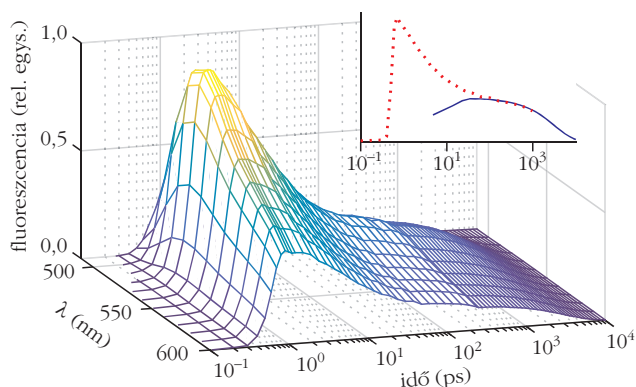
Homogén esetben a fluoreszcenciakinetika egyetlen exponenciálissal írható le, ezért kézenfekvőnek látszik, hogy a heterogén kinetikákat exponenciális komponensek összegével jellemezzük. Erre a közismert nemlineáris legkisebb négyzetek módszere tűnik a legalkalmasabbnak, amely során a

$$\sum_{i=1}^n \left[y_i - \sum_{j=1}^m a_j \exp\left(-\frac{t_i}{\tau_j}\right) \right]^2 \quad (5)$$

kifejezést minimalizáljuk, amelyben t_i a mérési időpontokat, y_i a hozzájuk tartozó mért értékeket jelentik, a_j és τ_j pedig a meghatározandó illesztési paramétereket. Világosan látnunk kell azonban, hogy ez az eljárás több alapvető problémát is felvet:

1. A legtöbb esetben nincs előzetes információ arról, hogy hány exponenciálissal illesszünk. Az m növelésével nyilvánvalóan javul az illesztés minősége, de egyáltalán nem triviális, hogy hol kell megállnunk.

2. A multiexponenciális illesztés erősen instabil (ill posed) probléma: az adatokat terhelő kis zaj is nagyfokú bizonytalanságot okoz az illesztési paraméterekben.



5. ábra. Az FAD vizes oldatának fluoreszcenciakinetikája különböző hullámhosszértékeken. Belső ábra: a felkonvertálás (pontozott vonal) és a TCSPC (folytonos vonal) módszerével mért kinetikák 200 nm-nél összeillesztve.

3. A minimalizálási probléma nem konvex, tehát az illesztési paraméterekre előzetes becslést kell adnunk, és az optimalizáló algoritmus könnyen elakadhat egy-egy lokális minimumban.

A (3) probléma megoldására ma már léteznek speciális algoritmusok, azonban a (2) probléma miatt nincs garancia arra, hogy a globális minimum azonos a helyes megoldással.

Az (1) és (3) problémát együttesen úgy kezelhetjük hatékonyan, hogy a τ_j időállandóknak nem engedünk meg folytonos értelmezési tartományt, hanem előírjuk: csak egy véges intervallumon belüli, előre meghatározott diszkrét értékeket vehetnek fel. Megengedjük viszont, hogy az összes ilyen τ_j modellünk része legyen. Nyilvánvaló, ha az intervallum elég széles, és m értéke kellően nagy, ez a kényszer a modell pontosságát gyakorlatilag nem korlátozza. Könnyen látható, hogy az így átfogalmazott probléma azonos az

$$\mathbf{y} = \mathbf{A} \mathbf{x} \quad (6)$$

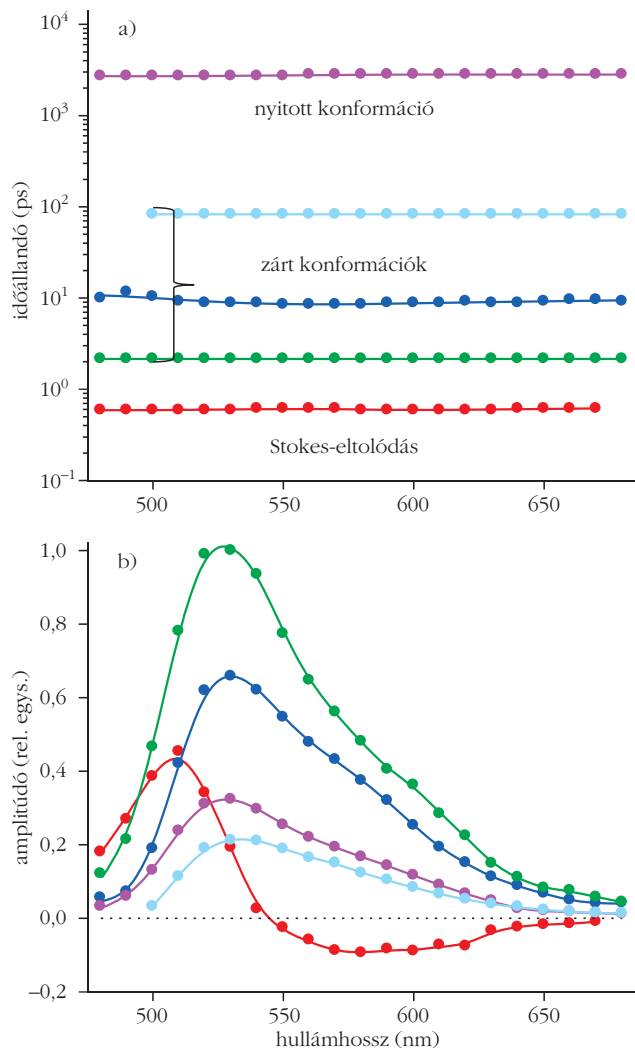
egyenletrendszer megoldásával, ahol \mathbf{y} az y_i értékekből képzett vektor, az $n \times m$ \mathbf{A} mátrix elemei

$$A_{ij} = \exp\left(-\frac{t_i}{\tau_j}\right),$$

a meghatározandó \mathbf{x} vektor pedig a τ_j értékekhez tartozó amplitúdókat tartalmazza.

A fenti, átfogalmazott probléma numerikusan rendkívül könnyen és gyorsan megoldható, jelen formájában azonban még használhatatlan. Nyilvánvaló ugyanis, hogy a (6) egyenletrendszernek csak $m = n$ esetben van egyértelmű megoldása. Ez egyrészt m értékét – amit pedig kellően nagyoknak szeretnénk venni – feleslegesen korlátozza. Másrészt e megoldásnál még erősebben jelentkezik a (2) probléma, mint az (5) illesztésnél, így eredményül általában teljesen értelmetlen, zajszerű megoldást kapunk.

Vegyük észre azonban, hogy ezzel a modellel kissé túllőttünk a célon! Ugyanis megengedtük, hogy nagyszámú τ_j járuljon hozzá a kísérleti adatok modellezéséhez, de azt nem gondoltuk komolyan, hogy tényle-



6. ábra. Vizes oldatban mért FAD fluoreszcenciakinetikák multitask analízise hierarchikus Bayes-modell alapján. Az eredményül kapott időállandók (a) és a hozzájuk tartozó spektrumok (b) különböző hullámhosszokon.

gesen mindegyik hozzá is fog járulni. Ellenkezőleg, a legtöbb esetben előzetesen azt várjuk, hogy a kísérleti adatok mégiscsak leírhatók néhány exponenciális taggal. De melyikkel a sok közül? A problémát ismét átfogalmazva, a számunkra ideális modell megengedné az $m > n$ (akár az $m \gg n$) esetet is, ami által a (6) egyenletrendszer alulhatározottá válna, ennek ellenére lenne egyértelmű megoldása, ráadásul olyan, amelyben a legtöbb amplitúdó értéke zérus, kivéve néhány valóban domináns tagot, anélkül, hogy előre megmondanánk, melyek ezek.

Szerencsére e furcsának tűnő igénnyel nem vagyunk egyedül. Az utóbbi években az alkalmazott matematika egy új ága jött létre, amely a „tömörített érzékelés”-nek fordítható compressed sensing megközelítési módszeren alapul. Ennek célja pedig éppen az, hogy alulhatározott egyenletrendszer sok zérust tartalmazó (ritka, sparse) megoldását keresse. (Közismert igény például, hogy olyan kodeket találjunk, amellyel egy videó a lehető legritkább adatsorral legyen reprezentálható, ami azonos a nagyfokú

tömöríthetőséggel.) A részletesség igénye nélkül az alábbiakban néhány ilyen módszert mutatunk be.

Egy igen elegáns és meglepő tétel [5] értelmében a legtöbb \mathbf{A} mátrixra a

$$\sum_{i=1}^n \left(y_i - \sum_{j=1}^m A_{ij} x_j \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^m |x_j| \quad (7)$$

kifejezés minimalizálásával nyert \mathbf{x} jól megközelíti a legritkább megoldást. A kifejezés első tagja megfelel a legkisebb négyzetek értelmében vett (6) egyenletnek, a ritkaságot a második tag biztosítja. A λ paraméterrel állítható be az illesztés jósága és a ritkaság mértéke közötti egyensúly. Saját vizsgálataink [6] szerint a (7) formula minimalizálásán alapuló BPDN vagy LASSO nevű optimalizálási eljárás igen alkalmas a többkomponensű fluoreszcenciakinetikák analízisére.

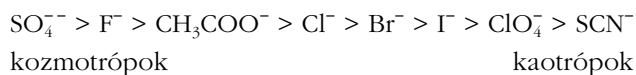
A lineáris egyenletrendszerek ritka megoldásai a Bayes-féle valószínűségelmélet alapján is jól közelíthetők. E módszer lényege, hogy \mathbf{x} elemeit valószínűségi változóknak tekintjük, amelyekhez valamely meg gondolás alapján egy előzetes (prior) eloszlást rendelünk. Az adatokkal való összehasonlítás eredményeként – az azokat terhelő zaj megfelelő modellezésével – megkapjuk \mathbf{x} végső értékeit. Megmutatható, hogy egy megfelelő (Laplace) prior választásával ez az eljárás szintén a (7) kifejezéshez vezet [7].

A saját céljainkra eddig legjobban megfelelő módszer egy hierarchikus Bayes-modellen alapul, amely multitask formában is alkalmazható [8], tehát alkalmas például az összes hullámhosszon mért adat koherens kiértékelésére. Az eljárást az FAD vizes oldatának fluoreszcenciakinetikájára alkalmazva a 6.a ábrán mutatott időállandókat kapjuk a 6.b ábrán feltüntetett amplitúdókkal. Látható, hogy a megoldás valóban ritka, a különböző hullámhosszokhoz tartozó időállandók közel azonosak, a megoldás mégis igen komplex. A 3 ns-os időállandó egyértelműen a nyitott konformációhoz rendelhető, a pikoszekundum-tartományba eső három komponens pedig – feltehetőleg – különböző zárt szerkezetekhez. A ~600 fs-os komponens amplitúdója kis hullámhosszokon pozitív, utána negatív, ami egy spektrális eltolódásnak felel meg. Ez azonosítható az 1. ábrán mutatott vibrációs relaxációnak megfelelő Stokes-eltolódással.

Hofmeister-effektus, nem csak makromolekulákon

Az FAD fluoreszcenciakinetikájának komponensei és a molekula konformációs állapotai között fennálló szoros kapcsolat lehetővé teszi, hogy ezen a molekulán tanulmányozzuk a Hofmeister-effektust [9]. E 19. század végén felfedezett jelenség lényege, hogy az anionok egy csoportja (kozmotrópok) nagy koncentrációban – a zárt konformációs állapotok elősegítésével – növeli a fehérjék és egyéb makromolekulák aggregációs hajlamát. Egy kaotrópoknak

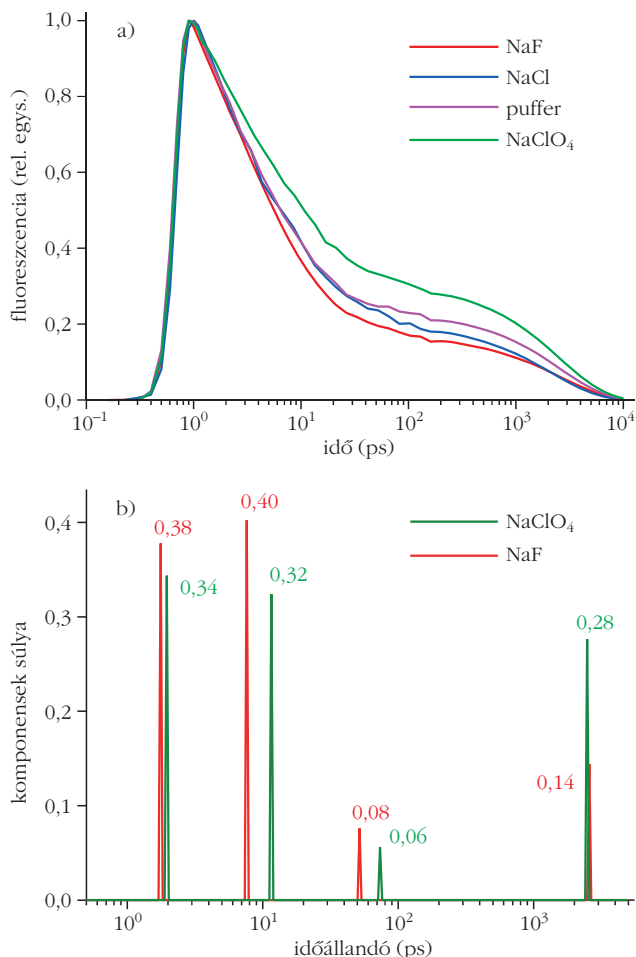
nevezett másik csoport éppen ellenkező hatású. A hatás iránya és mértéke szerint az anionok az alább sorba rendezhetők:



A jelenség pontos fiziko-kémiai háttere máig tisztázatlan. Célszerűnek találtuk tehát, hogy az effektust a kis méretű FAD-molekulán – amelyen a fluoreszcenciakinetikai kísérletek mellett molekuladinamikai/kvantummechanikai számítások is elvégezhetők – is kimutassuk. A 7.a ábrán az 530 nm-en mért FAD fluoreszcenciakinetikák láthatók a só nélküli puffer, a semleges NaCl, az erősen kozmotróp NaF és az erősen kaotróp NaClO₄ jelenlétében (pH = 7,0, sókoncentráció 900 mM). Már e kinetikákból is nyilvánvalóan látható, hogy a pufferhez képest a kozmotróp ion jelenléte csökkentette, a kaotrópé pedig növelte a lassú komponens arányát. Az előző fejezetben bemutatott analízis eredményei ezt még inkább alátámasztják (7.b ábra). Tökéletes összhangban a Hofmeister-effektustól várható hatással a nyílt konformációhoz rendelhető 3 ns időállandójú komponens súlya NaClO₄-ban kétszerese a NaF-ban mutatott értéknek, miközben a két szélső esethez tartozó időállandók gyakorlatilag változatlanok maradtak.

Irodalom

1. ELI-ALPS. <http://www.eli-hu.hu>
2. https://en.wikipedia.org/wiki/Jablonski_diagram – Jablonski-diagram.
3. G. F. Li, K. D. Glusac: The role of adenine in fast excited-state deactivation of FAD: a femtosecond mid-IR transient absorption study. *J. Phys. Chem. B* 113 (2009) 9059–9061.
4. T. Nakabayashi, M. S. Islam, N. Ohta: Fluorescence decay dynamics of flavin adenine dinucleotide in a mixture of alcohol and water in the femtosecond and nanosecond time range. *J. Phys. Chem. B* 114 (2010) 15254–15260.
5. D. L. Donoho: For most large underdetermined systems of equations, the minimal l(1)-norm near-solution approximates the sparsest near-solution. *Commun. Pure Appl. Math.* 59 (2006) 907–934.
6. G. I. Groma, Z. Heiner, A. Makai, F. Sarlos: Estimation of kinetic parameters from time-resolved fluorescence data: A compressed sensing approach. *RSC Advances* 2 (2012) 11481–11490.



7. ábra. Hofmeister-effektus az FAD molekulán. a) Fluoreszcenciakinetikák 530 nm-en különböző Hofmeister-sók jelenlétében. b) A leggyorsabb és leglassabb kinetikához tartozó komponensek relatív súlyai.

7. S. D. Babacan, R. Molina, A. K. Katsaggelos: Bayesian compressive sensing using Laplace priors. *IEEE Transactions on Image Processing* 19 (2010) 53–63.
8. S. Ji, D. Dunson, L. Carin: Multitask compressive sensing. *IEEE Transactions on Signal Processing* 57 (2009) 92–106.
9. P. Lo Nostro, B. W. Ninham: Hofmeister phenomena: An update on ion specificity in biology. *Chem. Rev.* 112 (2012) 2286–2322.

2017. augusztus 25-én megtartották az ELI-ALPS első tanártovábbképzését

A képzésre 23 középiskolai tanár érkezett, az ország 14 középiskolájából. Főként matematika-fizika szakos tanárok, de kémia- és biológiaszakosok is voltak közöttük. A visszajelzések szerint a továbbképzés sikeres volt, a résztvevők felrészítették lézerekkel kapcsolatos tudásukat és áttekintő képet kaptak az ELI-ALPS berendezéseiről, kutatási irányairól és működéséről. Az ELI-ALPS a képzést évente tervezi megrendezni, és keresi a lehetőséget, hogy akkreditált tanártovábbképzésként hirdethessék meg.



A MAGYAR KÉZMŰVES HOLOGRÁFIA HŐSKORA

2. rész: látványholográfia

Horváth Zoltán György

MTA Wigner Fizikai Kutatóintézet SzFI

Nehéz eldönteni, hogy a hazai holográfia kezdeteivel foglalkozó cikk első részében bemutatott, 50 éve készült első hologramjaink a tudomány vagy inkább a látványholográfia kategóriájába illeszkednek. Az 1950-es, '60-as években sok, „nyugaton” létező eszköz, műszer, műszaki megoldás, pénzügyi, politikai, katonai, biztonsági stb. okok miatt itthon elérhetetlen volt. Ezek magyarországi reprodukciójára csak a szakmában élenjáró kutató-fejlesztő intézetek, egyetemek, azok munkatársai voltak képesek, így szinte minden ilyen sikerre (GM-csövek, lézerek, számítástechnika) műszaki-tudományos eredményként tekintettünk. Talán ide tartoznak a kutatóintézetekben produkált első hologramok is, amelyeket valószínűleg majdnem annyian megcsodáltak, mint az alább bemutatandó, sok kiállítást megjárt alkotásokat.

Az akkori témaválasztást nem a művészi fantázia, hanem szinte kizárólag a megvalósíthatóság és a holográfia különlegességének egyszerű demonstrálhatósági igénye „ihlette”. Kis koherenciahosszúságú, és elég kis teljesítményű lézereink voltak, ami eleve meghatározta, hogy csak kis méretű tárgyakat lehetett holografálnunk. Ezeket igyekeztünk úgy elhelyezni, hogy a szemlélők számára – a nézőpont változtatásával – a tárgyak helyzetének változása jól látható legyen. Az autó, elefánt és kisház pozíciói úgy változtak, mint azt a valóságban észlelhettük (1. rész, 2. ábra), sőt a vízszintesen elhelyezett tükrön is (1. rész, 3. ábra) más és más részlet reflektálódik a környezetből, attól függően, hogy milyen irányból nézzük a hologramot.

Egy klasszikus hologramot kizárólag lézérfényvel lehet rekonstruálni, azaz korrekten módon láthatóvá, élvezhetővé tenni. A hologram elemi optikai rácsok (fényhullámhossz nagyságrendjébe eső periodicitású) látszólag kusza sokaságát tartalmazza, azok szuperpozíciójaként nyilvánul meg. Ha ezt fehér fényvel megvilágítjuk – fényforrástól függően –, a szivárvány színeinek ugyancsak rendezetlen sokaságát láthatjuk, hiszen a rács színbontást végez, véletlenszerű irányokban. Néha lehet sejteni az egyszerűbb ábrák tárgyait, de a diffrakciós szögek és nagyítási viszonyok

hullámhosszfüggése igencsak próbára teszi fantáziánkat. A helyzetet javíthatja, ha színszűrővel korlátozzuk a megvilágítás sávzélességét, például a fehér helyett csak piros inkoherens fényt használunk. Így már láthatunk valamit, sőt egy jól kiválasztott higanylámpavonallal (spektrálisan szűrt fényével) Gábor Dénes 1947-es hologramját is láthatóvá tehetnénk. Az elvben elvárható felbontású látvány eléréséhez mindenképpen lézerre volt szükség, még annak ellenére is, hogy a koherens lézérfény természetes szemcsezaja kissé zavarja a látott képeket.

Az első hologramok megtekintésének komoly korlátja volt tehát, hogy bemutatásukhoz is lézert kellett. Mivel akkoriban kevesen tartottak otthon lézereket, így az érdeklődők kizárólag kutatóintézeti látogatósokon, ismeretterjesztő előadásokon, esetleg alkalmi kiállításokon találkozhattak holografikus látvánnyal. Kezdetben még akkor is csak kis látószögű, egyszerű képekben gyönyörködhetek. Alapvetően a felvételkor használt lézérfény színe határozta meg a színhatást.

Körbejárható hologramok

A hologram térbeli képet ad. Miért nincs teljesen körbejárható hologram, kérdezték többször is az érdeklődők. Elvben ugyan semmi akadály nem lett volna, de az első időkben használt kis méretű, sík spektrálemekkel ez illúzióknak tűnt. A kutató-fejlesztők viszonylag hamar kielégítették a fogyasztói igényt. Nehéz volt megcsinálni, csaltak is egy kicsit (nagyot) de a piac, főleg a reklámpiac törvényei – akárcsak manapság – sok mindent felülírtak.

Majdnem tökéletesen tűnő, körbejárható látványt nyújtottak az úgynevezett: kompozit hologramok, amelyek hologramok is, meg nem is. Tipikus esetben egy normál fényképezőgéppel körbefényképezték a tárgyat, akár több száz fotót is készítve róla. A fényképeken természetesen elveszett a térbeliség, viszont a módszerrel, adott szögfelbontással, minden irányból rögzítették a látványt. Ezek után a fényképekről(!) hologramokat készítettek, és ezeket néhány milliméteres csikokban egymás mellé helyezték. Ha flexibilis volt a rögzítő anyag, akkor a két végét összeillesztve kialakult egy teljesen körbejárható hologram-hengerpalást. Ez tényleg produkálta a közepen lebegő tárgy illúzióját, annak ellenére, hogy nem a hologramok, hanem az emberi szem két látószöge – ami a kompozit rendszer mindig más-más elemét hozta látótérbe – produkálta a térbeliséget. Kissé zavaró volt ugyan, hogy a fehér fényű rekonstrukció miatt a kép színeire bomlott, de ezt a látogatók könnyen megszokták.



Horváth Zoltán György 1969-ben szerzett fizikus diplomát az ELTE-n, s azóta a KFKI-ban (Wigner FK) dolgozik, jelenleg nyugdíjasként. 1992 óta kandidátus. Nagy intenzitású fény-anyag kölcsönhatással és lézérfizikával – sokfotonos folyamatok, pikoszekundum-mérő, síkban sugárzó (Halo) diszklézerek, biofotonika és új típusú, leképező ellipszometria – foglalkozott. Lézeres szakemberek oktatásán túl ismeretterjesztő cikkekkel, TIT-előadásokkal, rádió- és tv-műsorokkal népszerűsítette a fényfizikát.

A Budapesti Műszaki Egyetem (BME) Alkalmazott Biofizikai Intézetében és a Gépgyártástechnológia Tanszéken is tevékenykedő *Greguss Pál* – több más optikai, fotobiológiai és akusztikai téma mellett – holográfiával is foglalkozott. Az ő ötletére és közreműködésével készült az 10. ábrán látható kompozit hologram a Magyar Nemzeti Múzeumban kiállított eredeti Szent Koronáról. A körbefordulás során exponált, színes fényképeiről (közel 800 db, azaz $0,5^\circ$ körüli szögfelbontás) japán fizikusok készítették a körülbelül 2 mm-es csíkokat tartalmazó, teljesen körbejárható, de fehér fényvel reprodukálva a szivárvány minden színét mutató kompozit hologramot.

Érdeemes megjegyezni, hogy külföldön az első „mozgó” hologramokat ugyancsak kompozit technikával készítették, a rövid „jelenetek” filmkockáiról. Futtatásukhoz az ember fejét, vagy a kompozit lemezt körülbelül úgy kellett mozgatni, mint ahogy a vetített mozi előtti klasszikus mozgóképek figurái keltek életre anno. A kéretlen színbontás természetesen itt is megjelent a látványon.

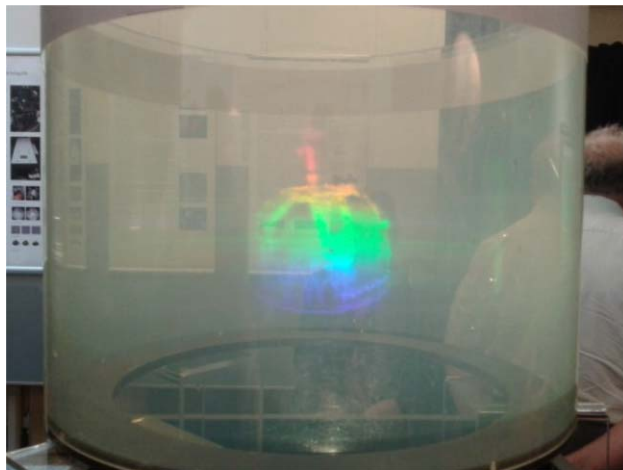
Egy színből túl sok szín

Idősebbek még emlékezhetnek az első fekete-fehér televíziók házilagos színéssé tételére: árultak olyan átlátszó fóliákat, amelyek alul zöldek, középen sárgás pirosak felül pedig kékek voltak. Ezt a képernyőre ragasztva a bemondók ugyan cifrán néztek ki, de az akkoriban közkedvelt focimeccs közvetítések egészen elfogadható illúziót nyújtottak a füves pálya, nézők, az égbolt látványát tekintve. Voltak sikeres próbálkozások az egyszínű hologramok színesítésére is.

Egy műszaki újdonság üzleti sikerének elengedhetetlen feltétele (sok egyéb mellett), hogy a feltételezett felhasználók akár otthon is élvezhessék előnyeit. Hologramok esetén ezt a kritériumot az egyszerű fehér fényvel megvilágítható színes hologramok elkészíthetősége elégítette volna ki.

Mint említettük, egy klasszikus hologram fehér fényben néha semmit, kis ügyességgel pedig akár csodás, művészi szín- és látványorgiát is produkálhat, amelyen alig-alig ismerhető fel az eredeti tárgy. Néhány egyszerűbb esetben, jól formált fehér megvilágítással kivehető volt valami a színes kavalkádból. A „művészien” fehérbontott jelenséget megideologizálták, és a triviális hibát produkáló termékeket szivárvány-hologramoknak nevezték el. Ja, ha ez a szivárvány-hologram, akkor minden OK, bólogatott a gyanútlan szemlélődő. Pedig ez nem volt az.

S. A. Benton 1967-ben megalkotta az „igazi” szivárvány-hologramokat. A felvételeknél használt vízszintes rés segítségével elérte, hogy élvezhető legyen a fehér fényvel előcsalható hologram. Az eredetileg egyszínű hologram látványa fehér fényben, vízszintes sávokban a szivárvány minden színében pompázott. Ha szivárvány, akkor szivárvány, de legalább már nem kell hozzá lézer. Zárójelben jegyezném meg, hogy e technika reflexiók változata aratta/aratja az



10. ábra. Az eredeti Szent Korona körbefotózásakor exponált közel 800 fényképfelvételből készített, körbejárható kompozit hologram (Greguss Pál, BME és japán kompozithologram-feldolgozás).

„alkalmazott holográfia” legnagyobb világsikerét. A fehér fényben szögfüggő színes reflexiókat produkáló, másolásvédelem ellen használt, tipikusan reflexiók hologramok ott lapulnak pénzeinken és fontos iratainkon. A holográfia kezdetekor, a páncélszeker-nyekben sok lakat alatt őrzött sokszorosító „stencil” gépek korában, még senkinek nem jutott eszébe, hogy a tökéletes színes másolás elleni védelemre is szükség lehet valamikor.

Színes hologramok

Mire holografáljunk? Már rég a feledés homályába merült az a fotótörténeti tény, hogy a színes fényképezést már jóval a színes fényképezés megjelenése előtt kitalálták! Pontosabban: a három alapszint tartalmazó pigmentes emulziók kifejlesztését sokkal megelőzve, az úgynevezett: „Lippmann-féle színes fotográfia” fekete-fehér(!) emulziókkal is képes volt színes képeket létrehozni. Sajnálatos, hogy ezt a hazai fotótörténeti munkák sem tartalmazzák, pedig *Gabriel Lippmann* 1908-ban fizikai Nobel-díjat kapott „Azért a módszeréért, amellyel az interferencia jelenségére alapozva fotografikus úton színeket reprodukált” (már 1891-ben).

Mi is volt Lippmann módszere? Ha egy tükörrre monokromatikus és koherens fényt ejtünk, akkor a tükör előtti térben, a beeső és reflektált fény interferenciája miatt a hullámhosszhoz és beesési szöghöz illeszkedő nulla-, és maximális intenzitású, egymással párhuzamos fényrétegek alakulnak ki. Mivel a koherenciahosszat a vonalszélesség határozza meg, a teljes fehér spektrumra nem, de egy adott színre már megfelelő lehet a tükrös megoldás néhány hullámhossznyi önkoharenciája által megengedett interferencia. Amennyiben a tükörrre felvitt vastag fotoemulzió például ezüst alapú, akkor abban, az előhívás után a maximális intenzitású helyeken tökéletes ezüstretegek sokasága jön létre, azaz kialakul a ma ismert és elterjedt interferencia tükör/szűrő-rendszer. Egy ilyen rétegsort

fehér fényvel megvilágítva, arról csak az exponálásnál használt szín reflektálódik. (A harmonikusok kívül esnek a látható tartomány körülbelül egy oktávján.) A fotólemezzre exponált kép minden pontjában előhíváskor az ottani lokális színnek megfelelő színszűrő réteg keletkezik, azaz a fekete-fehér emulzió fehér fényben korrekt színes képet hoz létre. A bonyolult technika miatt (Lippman tálkába öntött higany felületén úsztatta a vastag fotoemulziót) az eljárás nem terjedt el, de Lippmann úttörő munkájával nem csak az interferencia-tükrök/szűrők technikáját, hanem a színes holográfiát is megalapozta.

A fehér fényű színes holográfia megalkotása *Yuri N. Denisjuk* nevéhez fűződik, aki első, még egyszínű kísérleteiben már 1962-ben ötvözte a holográfiát a Lippmann-módszerrel. Sok évnek kellett még eltelnie, hogy a megoldás általánosan használhatóvá váljon. A műszaki részleteket mellőzve, csak egy rövid felsorolás: nem csak a vékony ezüst rétegek, de az emulzió periodikus törésmutató-változásai is alkalmasak interferometrikus reflexióra, illetve komplementer transzmisszióra. Az átlátszó emulzió alatti tükör helyett az emulzióban egymással szembe haladó koherens fénynyel is lehet állóhullámokat produkálni. Ehhez nagy sorozatban, megbízható minőségű, megfelelő felbontású, vastag (sok mikrométer, de akár 1-2 mm) emulziós, sokszor nagyméretű fotólemezeket kellett gyártani, amelyek speciális előhívási, fixálási procedúrát igényeltek. Több mint tíz-tizenöt évnek kellett eltelnie, mire a holográfusok – az egyszínű, vékony (néhány mikrométeres), holográfiára alkalmassá tett spektrállemezek mellett – színes hologramok készítésére világszerte használni kezdhették, a lézer nélkül, inkoherens fehér fényvel is reprodukálható Denisjuk-féle vastag (egy, de inkább több nagyságrenddel vastagabb) emulziós fotólemezeket.

Mivel holográfáljunk? A klasszikus hologramok exponálásához továbbra is koherens forrásokra, azaz lézerekre van szükség.

Egyszínű lézerral exponált vastag hologramokról, fehér fényvel rekonstruálva, az eredeti lézer színében jelenik meg a látvány. Sokféle emulziókezelő és előhívási technikával módosíthatók az exponált fotóanyag „rácsállandói”, azaz a hologramok színei változtathatók.

Amennyiben fehér fényű, a valódi színeket reprodukáló hologramot szeretnénk készíteni, az exponálásához szükséges három alapszínből kezdetben a pirosat a szokásos 633 nm-es He-Ne lézer vonal szolgáltatta, míg a kék és zöld vonalakat az argon-ion lézerek. Utóbbiak nemcsak, hogy megfizethetetlenül drágák voltak, de alacsony hatásfokuk miatt a néhány watt fénytéljesítményhez szükséges 10-20 kW-os áramellátás biztosítása és a keletkezett hő folyamatos hűtővizet elvezetése is komoly problémát okozott, nem is beszélve a tipikusan 2-3000 üzemórásra alkalmas csövek cseréjéről. Az Ar-ion lézerek kisebb, lég-hűtéses változatai teljesítményben jobban illeszkedtek ugyan a holográfiához, de megbízhatóságuk, stabilitásuk nagyon sok gondot okozott.

Tehát a színes hologramokat minimum két lézerral kellett készíteni, és a borsos fotólemezzárak mellett egy ilyen labor (műterem) felszerelése minimum 50–100 ezer USD nagyságrendjébe került. Ezt kevesen engedhették meg maguknak.

Az argon-ion lézerek elterjedésével, a könnyűzenei koncertek hatalmas showműsorai látványelemekként egyre gyakrabban alkalmaztak lézerforrásokat, tipikusan argon-ion lézereket. Ezek a produkciók már viselni tudták a lézerek költségeit. Szegényebb országokban, sok helyen alakult ki az a sajátos szimbiózis, hogy a jobbára műszaki, fizikusi háttérű holografálók üzemeltették a koncertek lézereit, cserébe a lézereket hologramok készítésére használhatták.

A rohamosan fejlődő lézeres látványtechnika elemi igénye volt a három alapszint emittáló „fehér” lézerek fejlesztése. Ar/Kr gázkeverékkel sikerült ilyen ionlézereket létrehozni, de a folyamatos fehéregyensúly fenntartása komoly műszaki artistamutatványnak számított. Szerencsére a holográfia megelégedhetett pusztán az alapszínnek meglétével.

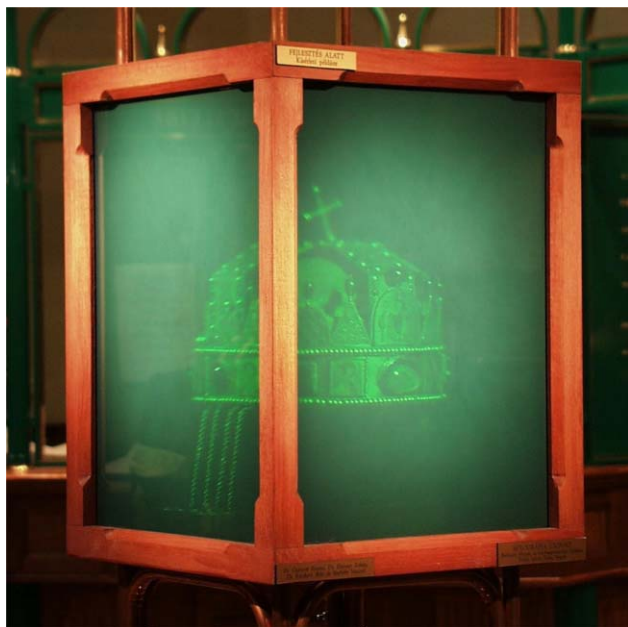
Az első részben említett, gyors folyamatok holografikus mérésére alkalmas impulzuslézerek közül a rubinlézer piros, és az infravörös neodímiumlézerek (üveg vagy YAG) zöld felharmonikusa (530 nm) már nagyon korán rendelkezésre állt. A kék viszont hiányzott, így ritka az impulzuslézeres színes hologram. Nanoszekundumos impulzuslézereket a látványvilágban, a mikrométeres elmozdulási zavarok kivédése miatt leginkább az élő emberekről készült holografikus portrék felvételekor használtak.

Emlékeim szerint valamikor a hetvenes években a fényképészek világát alaposan felbolygatta az egyiptomi régészek bejelentésének híre, miszerint bizonyítékokat találtak arra, hogy lyukkamerákkal már a fáraók idejében is készítettek fényképeket, még portrékat is. Az ősi fotóanyagok többnapos expozíciót igényeltek, ezért a modellekről előbb szobor készült, és csak arról a fotó. Kár, hogy az eredeti cikk az egyik leghíresebb fotószaklap április elsejei számában jelent meg. Az ősi hoaxot életre keltve, főleg szembiztonsági okokból még ma is szobrokról készül sok portré-hologram. Jellemzően csak a mérni és számolni jól tudó fizikusok vállalják a nyitott szemmel készült, direkt holoarckép-expozíciókat.

A hetvenes évek végén már minden műszaki feltétellel rendelkezésre állt, ami lehetővé tette a látvány szempontjából komoly érdeklődésre számot tartó, jó minőségű, fehér fényben látható, színes hologramok elkészítését.

Magyar holográfusok

Itthon a BME Fizikai Tanszéke volt a színes holográfia fellelvára. Sok helyről kaptak megkeresést profi hologramok készítésére. Jobbára a múzeumok féltett kincsei, ékszerek, fényre érzékeny iratok, képek, műre-mekek esetén volt célszerű a vitrinben lévő tárgyakat azok hologramjaival helyettesíteni. Petőfi Sándor da-



11. ábra. A Szent Korona másolatáról készített négyirányú, körbejárható hologram. (BME Fizikai Tanszék: Gyimesi Ferenc, Füzessy Zoltán, Ráczkevi Béla és Borbély Venczel munkája.)

gerrotípiájától a korhű Edison-lámpán át, IV. Károly király személyes használatú telefonjáig terjedő változatos skála miatt sok kiállításon bizonytalanodhat el a látogató, hogy az eredeti tárgyat, vagy annak „csak” szinte tökéletes hologramját látja. A Tanszék munkatársai közül a múlt század nyolcvanas éveiben *Füzessy Zoltán* és *Gyimesi Ferenc* készítették a fenti látványhologramokat. Később *Ráczkevi Béla* és *Borbély Venczel* is bekapcsolódott a munkába, miközben Gyimesi Ferenc tevékenysége egyre meghatározóbb lett. Természetes, hogy a Szent Koronáról (a másolatáról) a Tanszék munkatársai is készítettek kiváló minőségű színes, négy oldalról exponált, emiatt körbejárható, viszonylag nagy méretű hologramokat (11. ábra).

Sok fizikus, mérnök, technikus sajátította el a hologramkészítés technikáját. Ahogy az annak idején a fényképezésnél is megtörtént, a vizuális művészetek képviselőit is érdekelní kezdte az új technika. Festők, grafikusok, szobrászok vágta bele a fényművészetbe, ezen belül is a művészi holografikus látványok létrehozásába. Néhány magyar képzőművész külföldön készítette el holografikus alkotásait. *Csáji Attila* festőművész viszont már az 1980-as évek elejétől közösen dolgozott a KFKI és a BME lézerekkel és holográfiával foglalkozó munkatársaival. Sokak számára emlékezetes a Magyar Nemzeti Galériában 1984-ben *Króó Norbert* fizikussal közösen létrehozott *Lézerfotók és hologramok* című kiállításuk, amire rengetegen voltak kíváncsiak. Az ország lézerekkel és holográfiával foglalkozó szakemberei és készülékeik szinte mind felvonultak a várban rendezett kiállításra, hogy a zord, havas fagyos időben, hosszú sorokban órákig várakozó látogatók az akkori lézeres látványművészet szinte minden formáját megcsodálhassák. Erre az alkalomra készült a 12. ábrán látható hologram.

A holográfiában rejlő üzleti lehetőségeket felismerve például *Gál József* vágott bele a külföldről beszerzett, nagy sorozatban gyártott hologramok hazai értékesítésébe. *Varga Miklós* is híres hologramboltot üzemeltetett Budapesten, a Párizsi udvarban (ma Ferenciek terén).

A villamosmérnök végzettségű *Balogh Tibor* a Budapesti Műszaki Egyetemen, Greguss Pál laboratóriumában végzett munkája alapján, fehér fényű holografikus mérés technikából diplomázott, és lényegében önképzéses módszerrel fejlesztette magát látványholográfussá. A holográfia alapjait átlátva, megértve, annak egy lényegi elemét innovatívan módosította, és ma az egyik legsikeresebb, 3D-s megjelenítőket (hologram geometriai elvet megvalósító, úgynevezett 3D fénytér-technológiát) kifejlesztő világhírű magyar cég (Holografika Kft.) alapító tulajdonosa.

Egy He-Ne lézer piros fényével kezdte a saját laboratóriumában, amely elvben csak egyszínű képeket produkált volna, de a vastag emulziók teljes vagy részleges kézi hízalásával/zsugorításával (rácsállandó változtatásával) fehér fényben más színeket is meg tudott jeleníteni (13. és 14. ábra). Mindezt olyan sikeresen végezte, hogy 1984-ben *Németh Géza* építész-grafikussal megrendezte az első magyar önálló hologram-kiállítást az akkori Váci utcai Fotóművészeti Galériában. *Kulinyi István* grafikus designer is közreműködött több hologramja létrehozásában.

Az újabb technológiák kidolgozásához argon-ion lézerekre volt szüksége, ezzel már nem csak színes ho-

12. ábra. Csáji Attila, Gyimesi Ferenc: *Kő és tojás*.





13. ábra. Balogh Tibor: *Variációk*. Egyszínű piros He-Ne lézerrel készült színes hologram. A fehér fényben megjelenő színeket a vastag hologram egyes részeinek expozíció előtti, eltérő mértékű „hízalásával” érte el.

logramokat készített, hanem a lézer kék vonalának felhasználásával fotorezisztekre is exponált hologramokat. Ezekkel és az akkori nikkel galván nyomólemezek segítségével elindíthatta a hologramok hazai sokszorosítását, ami már túlmutat a klasszikus holográfia itt bemutatandó korszakán.

Hű maradt viszont a KFKI-ban nagyon régen készült és ma is jól működő He-Ne 1200-as lézeréhez a BME Fizikai intézeti állását magán-holográfusságra váltó Szabó Sándor. Céges reklámmegrendelések mellett például ő is készített a NOVOFER alapítvány korai Gábor Dénes Díjaira applikált mini hologramokat. Az egyszínű expozíciók színességének változtatásához ő mindvégig az emulzió zsugorítás technikáját (15. ábra) alkalmazta egyedi hangulatú holoképein.

15. ábra. Szabó Sándor: *Fityisz*. Emulziózsugorítással színesített fehér fényű hologram.



14. ábra. Balogh Tibor: *Zsuzsa*. Négy egymás feletti rétegű hiányos nagypixeles grafikáról készült felvétel, amin az elmozduló rétegekből egy adott irányból összeáll a teljes kép.

Záró gondolatok

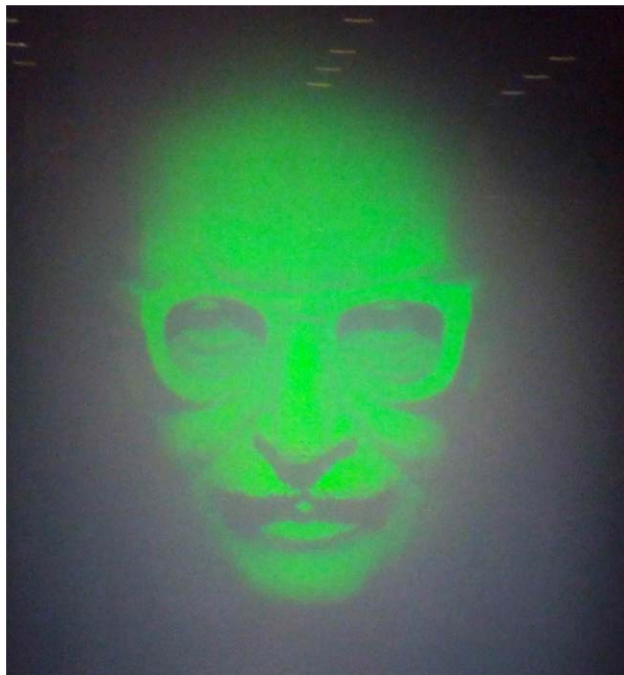
A holográfia világkarrierjét szemlélve, több mint hetven év elteltével, akár elégedettek is lehetnénk, hiszen elképzelhető-e nagyobb siker, mint az, hogy emberek milliárdjai naponta találkoznak a másolásvédelemként használt hologramokkal. Ezek mindennapi életünk részévé váltak. Erre a holografálás kezdetekor valószínűleg senki nem gondolt. Ugyanakkor a kezdeti elképzelésekből sok minden nem, vagy mára még nem úgy valósult meg, mint ahogy arra eredetileg számítottunk.

Hogyan lehetséges, hogy a napi és a bulvár sajtó mégis tele van csodás „holo” beszámolókkal, reklámokkal, amiknek néha semmi közük a holográfiához? Egyszerűen úgy, hogy finoman fogalmazva: a legtöbben csálnak! Az immár örök klasszikus Leila hercegnőhöz hasonlóan az élő Hawking megjelenés egy színpadon optikai trükk akkor is, ha hologramnak hívják, akkor is, ha ennek például semmi köze a holográfiához. A „holo” szóhoz – Gábor Dénes után – mára nemcsak társult, de az emberek agyába bele is vésődött a „-gráfia” folytatás. Lassan a „holo”, a 3D-s megjelenítés szinonimájává válik. Óvatosan kell tehát kezelni az ezzel kapcsolatos hírek és reklámok „üzeneteinek” valós fizikai tartalmát. Viszont, ha valamivel megéri jóhiszeműen vagy gátlástalanul visszaélni, az biztosan méltán vált az egész emberiség kincsévé.

A természettudományok a világ jelenségeinek egyre precízebb megfigyelésével lesik el annak viselkedését, tulajdonságait, ha úgy tetszik, törvényeit. Számomra különösen izgalmasak azok az eredmények, amelyeknek nincsenek természetes, alaposan tanulmányozható előzménye, alapja. Azok a felfedezések lelkesítenek, amelyek kizárólag az emberi elme csodálatos működésének teremtményei. Ezek közé tartozik – például – az évezredek gyökerekkkel bíró geometria és matematika. A fizika újkorában pedig már sok ilyen találatunk. Ide sorolhatjuk például a lézereket és a holográfiát.

Megalkotásuk előtt semmi hasonló nem létezett az általunk addig ismert világban. A természet ezeket valószínűleg „elfeledte” létrehozni. A lézereknél még ma sem zárhatjuk ki biztosan az esetleges „természetes” például a kozmikus térben kialakuló csillaglézerek létezését. A holográfia természetes formájának léte viszont nagyon valószínűtlennek tűnik. Remélem olvasóim is átérzik, hogy *Bolyai János*hoz hasonlóan Gábor Dénes (16. ábra) is egy „új” világot teremtett a semmiből.

Végezetül elnézést szeretnék kérni a cikk ábrái miatt. Reménytelen vállalkozás egy jól sikerült hangversenyről úgy írni, hogy a szöveget kissé hamis dudorászással illusztráljuk. Ugyanilyen élményvesztést eredményez a hologramok fotóinak bemutatása, amelyekből így éppen a művek lényege hiányzik. Remélem, hogy néhány év múlva – a 11 milliós példányszámú *National Geographic* 1984. márciusi és 1985. novemberi címlapjához, majd 1988. decemberi borítójá-



16. ábra. Kampf József szobrászművész BME kertben található Gábor Dénes szobráról Szabó Sándor készítette azt a hologramot, ami az egyetem Informatikai épületében állandóan megtekinthető.

hoz hasonlóan – már a *Fizikai Szemle* is valódi holográfikkal fogja megjelentetni a digitális és sokszorosított holográfia hazai eredményeit ismertető cikkeit.

A FIZIKA TANÍTÁSA

GONDOLATOK AZ EÖTVÖS-VERSENY 1. PÉLDÁJÁRÓL

1. rész: stacionárius eset

Tichy Géza – ELTE Anyagfizikai tanszék

Vankó Péter – BME Fizika tanszék

Vigh Máté – ELTE Komplex Rendszerek Fizikája tanszék

A 2016. évi Eötvös-verseny első példája egy súrlódással kapcsolatos mechanikai fizikapélda, amely újabb és újabb gondolatokat ébreszt, megoldása számos ötletet ad további feladatok számára. A feladat így szól:

Vízszintes helyzetű, elegendően nagy méretű, téglalap alakú rajztáblán egy begrafitozott, kicsiny pénzérme fekszik. A rajztáblát saját síkjában mozgatni kezdjük úgy, hogy középpontja R sugarú körön haladjon ω szögsebességgel, miközben oldalai az eredeti helyzetükkel mindvégig párhuzamosak maradnak.

Az érme és a rajztábla közötti súrlódási együttható μ , amelynek értéke elég kicsi ahhoz, hogy az érme folyamatosan csússzon.

Hogyan mozog az érme hosszabb idő után? Milyen nyomot hagy eközben a rajztáblán?

Ehhez a feladathoz csak a súrlódás fizikájának ismerete szükséges. Régi megállapítás, amelyet *Guillame Amantons* már 1699-ben leírt, hogy a súrlódási erő arányos a terheléssel és felületfüggetlen. A súrlódási erő sebességfüggetlenségét csupán később, 1785-ben fogalmazta meg *Charles Augustine Coulomb*. Azt a tényt, hogy iránya a két felület relatív mozgásának irányába esik, természetesnek vették. Amelyik felületre hat az erő, annak iránya a hozzá viszonyított sebességgel ellentétes irányú, és a másik felü-

letre ható erő ezzel ellentétes, teljesítve *Newton* harmadik törvényét.

A rajztábla minden pontja körmozgást végez, mégsem mondhatjuk e mozgásról, hogy forgómozgás, mivel oldalai eredeti helyzetükkel párhuzamosak maradnak. Így a rajztábla időben változó irányú eltolást, azaz translációt végez.

A rajztábla egy pontjának koordinátáit az idő függvényében felírva:

$$\begin{aligned} X &= R \cos(\omega t), \\ Y &= R \sin(\omega t). \end{aligned} \quad (1.a)$$

A rezgőmozgás kinetikájának ismeretében kapjuk a sebesség és a gyorsulás koordinátáit is:

$$\begin{aligned} V_x &= -R\omega \sin(\omega t), & V_y &= R\omega \cos(\omega t), \\ A_x &= -R\omega^2 \cos(\omega t), & A_y &= -R\omega^2 \sin(\omega t). \end{aligned} \quad (1.b)$$

A teljes mozgás analitikusan nem oldható meg, és a feladat is csak a hosszabb idő után beállt, stacionárius mozgás leírását tűzi ki célul. Ebben a cikkben mi is ezt kívánjuk megoldani. Könnyen megbecsülhető, hogy a stacionárius mozgás is körmozgás. Kézzel mozgatott papírlapon jól látszik a mozgás menete. Tegyük fel, hogy a mozgás körmozgás. Azonnal fel tudjuk írni az érme gyorsulásának komponenseit.

Mivel az érmére csak a súrlódási erő hat, a gyorsulás nagysága μg . A gyorsulás komponensei:

$$\begin{aligned} a_x &= -\mu g \cos(\omega t - \varphi), \\ a_y &= -\mu g \sin(\omega t - \varphi). \end{aligned} \quad (2.a)$$

Az asztal mozgásához képest beírtunk egy negatív előjelet és egy jelenleg ismeretlen fáziskülönbséget is, mert a mozgás az asztal mozgásához képest késhet – és késik is. Az előjelet azért írtuk, hogy a helykoordinátákban ne legyen negatív előjel. Most visszafelé haladva, a gyorsulásból a sebesség és a helyvektor komponenseit is felírhatjuk.

$$\begin{aligned} v_x &= -\frac{\mu g}{\omega} \sin(\omega t - \varphi), & v_y &= \frac{\mu g}{\omega} \cos(\omega t - \varphi), \\ x &= \frac{\mu g}{\omega^2} \cos(\omega t - \varphi), & y &= \frac{\mu g}{\omega^2} \sin(\omega t - \varphi). \end{aligned} \quad (2.b)$$

A gyorsulásból meghatározott sebesség még megengedne egy állandó, időtől nem függő sebességet is, de ehhez a súrlódás miatt erő is járulna, amit az állandósult mozgás feltétele nem enged meg. Hasonlóan, a helyhez is járul egy állandó, amely a körmozgás középpontját határozza meg. Ha koordináta-rendszerünk kezdőpontját a körpálya közepére helyezzük, ez sem jelenik meg.

A feladat megoldásához az a fizikai ismeret szükséges, hogy a súrlódási erő és így esetünkben a gyorsulás iránya megegyezik a két súrlódó felület relatív mozgásának irányával. Egyenlettel kifejezve

$$a_x = \beta (V_x - v_x) \quad \text{és} \quad a_y = \beta (V_y - v_y). \quad (3)$$

Ebbe helyettesítve a fent megadott (2) kifejezéseket.

$$\begin{aligned} -\mu g \cos(\omega t - \varphi) &= \\ &= \beta \left(R\omega \sin(\omega t) - \frac{\mu g}{\omega} \sin(\omega t - \varphi) \right), \\ -\mu g \sin(\omega t - \varphi) &= \\ &= \beta \left(-R\omega \cos(\omega t) + \frac{\mu g}{\omega} \cos(\omega t - \varphi) \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Mindkét összefüggés minden időben csak úgy állhat fenn, ha mind a szinuszos és mind a koszinuszos tagok együtthatója a két oldalon megegyezik. Ez négy egyenletet ad, de nekünk csak két ismeretlenünk van: φ és β . Azután, hogy meghatároztuk a négy egyenletet, a rejtély megoldása nyilvánvaló. Az első egyenlet szinuszos tagjaiból ugyanazt az egyenletet kapjuk, mint a második egyenlet koszinuszos tagjaiból és fordítva. A két egyenlet:

$$\begin{aligned} \mu g \cos \varphi &= \beta \frac{\mu g}{\omega} \sin \varphi, \\ \mu g \sin \varphi &= \beta \left(-\frac{\mu g}{\omega} \cos \varphi + R\omega \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Az egyenletrendszer megoldása kézenfekvő. A két ismeretlenre

$$\begin{aligned} \cos \varphi &= \frac{\mu g}{R\omega^2} \quad \text{és} \\ \beta &= \omega \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} = \omega \frac{\mu g}{\sqrt{(R\omega^2)^2 - (\mu g)^2}} \end{aligned} \quad (6)$$

kifejezést kapjuk.

Ha $\mu g > R\omega^2$, akkor a megoldás értelmetlen. Ez az a helyzet, amikor a rajztáblához képest az érme az erős súrlódás miatt nem mozog. Ha egyenlőség áll fenn, akkor a mozgás még nem indul meg, a két mozgás között nincs fáziszög, sugaruk is egyenlő, azaz a rajztáblán az érme áll.

A mozgást ezekkel az egyenletekkel majdnem teljesen meghatároztuk, ugyanis a fázistolás mértéke ismert. A meghatározás azért nem teljes, mivel semmi feltevést nem tettünk a körmozgás középpontjára. Az egyenletekből erre nem is következtethetünk, mert minden egyenletben csak a sebesség és gyorsulás szerepel, így a körpálya középpontja ismeretlen. A középpontot csak a teljes mozgás határozza meg, vagyis a mozgás kezdeti feltételei.

Hátra van még az érme nyoma a rajztáblán. A rajztáblához viszonyított mozgást az

$$\begin{aligned} x - X &= \frac{\mu g}{\omega^2} \cos(\omega t - \varphi) - R \cos(\omega t), \\ y - Y &= \frac{\mu g}{\omega^2} \sin(\omega t - \varphi) - R \sin(\omega t) \end{aligned} \quad (7)$$

formula adja.

Felhasználva a szögfüggvények addíciós képleteit:

$$\begin{aligned}
 x - X &= \left(\frac{\mu g}{\omega^2} \cos\varphi - R \right) \cos(\omega t) + \\
 &+ \frac{\mu g}{\omega^2} \sin\varphi \sin(\omega t), \\
 y - Y &= \left(\frac{\mu g}{\omega^2} \cos\varphi - R \right) \sin(\omega t) - \\
 &- \frac{\mu g}{\omega^2} \sin\varphi \cos(\omega t).
 \end{aligned} \tag{8}$$

A relatív koordinátákat kifejezhetjük φ és R függvényeként, kis átalakítással:

$$\begin{aligned}
 x - X &= R \sin\varphi \sin(\omega t - \varphi) = \rho \sin(\omega t - \varphi), \\
 y - Y &= -R \sin\varphi \cos(\omega t - \varphi) = -\rho \cos(\omega t - \varphi).
 \end{aligned} \tag{9}$$

A fenti képlet is körmozgást mutat

$$\rho = R \sin\varphi = \sqrt{R^2 - \left(\frac{\mu g}{\omega^2} \right)^2} \tag{10}$$

sugárral, és a körmozgás fázisa a rajztábla fázisához képest

$$\frac{\pi}{2} + \varphi$$

lemaradásban van. A körpálya sugara mind a rajztáblához viszonyított rendszerben, mind az álló, azaz inerciarendszerben kisebb, mint a rajztábla körmozgásának sugara.

Nemcsak arra a kérdésre feleltünk, amit a kitűzött feladat kérdezett, hanem a mozgást annál részletesebben, a nyugalmi rendszerhez és a rajztáblához viszonyítva írtuk le. Említettük, hogy a körpálya középpontja az állandósult megoldásban nem meghatározott, a pálya stabilitásának vizsgálatokor látni fogjuk, ez még megtárgyalandó problémát okoz.

A fent leírt megoldás elég bonyolult, különböző matematikai ismeretek egyszerűsíthetik a megoldást. A következőkben még két megoldási módot vázolunk. Az egyik a komplex számokat használja fel, ehhez a komplex számok matematikájának ismerete szükséges, de a másik, geometriai megoldás jóval egyszerűbben, érthetőbben jut a végeredményhez.

Komplex leírási mód

Az (1)-től a (3) képletekig az egyenleteket komplex alakba lehet átírni. Bevezetve az $\bar{X} = X + iY$, és $\bar{x} = x + iy$ komplex helyet, az (1) képlet a

$$\begin{aligned}
 \bar{X} &= R e^{i\omega t}, \\
 \bar{V} &= i\omega R e^{i\omega t}, \\
 \bar{A} &= -\omega^2 R e^{i\omega t}
 \end{aligned} \tag{11}$$

alakot kapja.

A (2) képlet az alábbiakra módosul:

$$\begin{aligned}
 \bar{x} &= \frac{\mu g}{\omega^2} e^{i\omega t} e^{-i\varphi}, \\
 \bar{v} &= i \frac{\mu g}{\omega} R e^{i\omega t} e^{-i\varphi}, \\
 \bar{a} &= -\mu g R e^{i\omega t} e^{-i\varphi}.
 \end{aligned} \tag{12}$$

A (4) képlet átírásában az exponenciális időfüggéssel azonnal lehet egyszerűsíteni.

$$-\mu g e^{-i\varphi} = i\beta \left(\frac{\mu g}{\omega} e^{-i\varphi} - \omega R \right). \tag{13}$$

E komplex egyenlet valós és képzetes részéből (ami természetesen most nem négy, hanem két egyenlet) φ -t és β -t meg lehet határozni (6).

A relatív mozgást leíró komplex mennyiség:

$$\bar{x} - \bar{X} = \left(\frac{\mu g}{\omega^2} e^{-i\varphi} - R \right) e^{i\omega t}. \tag{14}$$

A komplex amplitúdót a (6) képlet felhasználásával átalakítjuk.

$$\begin{aligned}
 \frac{\mu g}{\omega^2} e^{-i\varphi} - R &= R(\cos\varphi e^{-i\varphi} - 1) = \\
 &= R \left[(e^{i\varphi} - i \sin\varphi) e^{-i\varphi} - 1 \right] = \\
 &= R \sin\varphi e^{-i\left(\frac{\pi}{2} + \varphi\right)}.
 \end{aligned} \tag{15}$$

A (10) képletben meghatározott sugár felhasználásával a relatív mozgásra kapjuk:

$$\bar{x} - \bar{X} = \rho e^{i\left(\omega t - \left(\frac{\pi}{2} + \varphi\right)\right)}, \tag{16}$$

ami szintén mutatja a $\pi/2 + \varphi$ fáziskésést.

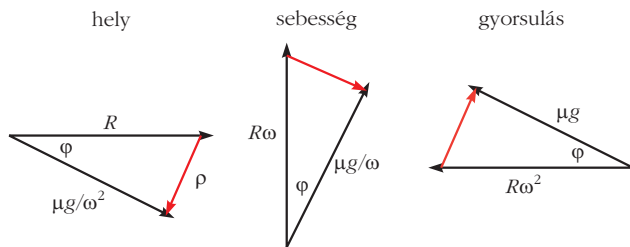
A komplex leírásmód ugyanazokat az eredményeket kevesebb számolással és áttekinthetőbben adja, de ennek használata – természetesen – bizonyos gyakorlatot kíván.

Geometriai megoldás

A megoldás lényegesen egyszerűsödik, ha az algebrai számolások helyett a vektorgeometriát hívjuk segítségül. Vegyük azt a pillanatot, amikor a rajztábla kitérését egy R hosszúságú vízszintes nyíl ábrázolja, ahogy ez a mellékelt *ábrán* látható. Ha az időfolyamatot nézzük, akkor ez a nyíl pozitív irányban forog, de most elég egy pillanatot ábrázolni. Az érme körforgásának sugara

$$\frac{\mu g}{\omega^2},$$

ezért ilyen hosszú vektorral jellemezzük, de az origótól φ szöggel lefelé áll (lásd az *ábrát*). A rajztábla se-



bességvektora függőlegesen felfelé áll, nagysága $R\omega$. Az érme sebességvektora szintén merőleges a helyvektorra, nagysága

$$\frac{\mu g}{\omega}$$

A gyorsulásvektorok további elforgatással nyerhetők, és nagyságuk $R\omega^2$ és μg .

Az ábrából minden információt leolvashatunk:

$$\cos\varphi = \frac{\mu g}{R\omega^2}$$

A Eötvös-verseny feladatának eredménye a rajztáblához viszonyított mozgás sugara, amit a Pitagorasztétel határoz meg:

$$\rho = \sqrt{R^2 - \left(\frac{\mu g}{R\omega^2}\right)^2}$$

Továbbá az érme gyorsulása és a sebességkülönbség hányadosából kapjuk β -t, és látjuk a rajztáblán lévő mozgás fáziskésését is.

A geometriai megoldás sokkal rövidebb, de többet hagyatkozunk gondolatainkra, több gondolkodással fizetünk. Azon megoldásban, ahol többet kellett számolnunk, a félreszámolás lehetősége nagyobb, az kevesebb gondolkodást, de több figyelmet követel.

Ez a cikk az állandósult, azaz stacionárius mozgással foglalkozott. Következő írásunk a teljes mozgás leírását tartalmazza, azt is, ahogy a stacionárius állapot beáll, valamint vizsgáljuk a mozgás stabilitását is. Vizsgálatunk nagy része a numerikus számolás eredményének taglalásából áll majd.

HÍREK – ESEMÉNYEK

ZAWADOWSKI ALFRÉD (1936–2017)

Zawadowski Alfréd akadémikus, nemzetközi híró elméleti fizikus, a Műegyetem korábbi igazgatója, professzor emeritusa 2017. augusztus 5-én elhunyt. A Széchenyi-díjas, iskolateremtő tudós nevéhez fűződik a hazai modern szilárdtest-fizikai kutatások elindítása, fizikusgenerációk felnevelése, a nemzetközi szintű műegyetemi fizikusképzés kialakítása.

Zawadowski Alfréd 1936-ban született Budapesten. Fizikusi oklevelét 1959-ben szerezte meg az Eötvös Loránd Tudományegyetemen. Az MTA Műszaki Fizikai Kutató Intézetében töltött gyakornoki évek után, 1962-től 1989-ig, 27 éven keresztül az MTA Központi Fizikai Kutató Intézete munkatársa, majd főmunkatársa, kutatóprofesszora volt. Tíz éven át irányította az Elméleti Szilárdtest-fizikai Csoportot, majd a KFKI Tudományos Tanácsadó Testületének vezetője lett. 1989 és 1992 között az MTA–ELTE Elméleti Fizikai Kutatócsoport kutatóprofesszoraként dolgozott. 1992-től a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Fizikai Intézetének egyetemi tanára, 1992 és 2001 között igazgatója. 2006 óta a BME professor emeritusa.

Kutató- és oktatómunkája mellett számos tudományos közéleti szerepet is vállalt: 1990 és 1993 között az Eötvös Loránd Fizikai Társulat alelnöke, 2013 és 2014 között elnöke volt. Évtizedeken keresztül volt a *Solid State Communications* folyóirat szerkesztőbi-

zottsági tagja, valamint tagja volt a *Fizikai Szemle* szerkesztőbizottságának is.

A fizikai tudományok doktora fokozatot 1969-ben szerezte meg: disszertációjában a kvantummechanikai alagútjelenség egy új elméleti leírását adta normál és szupravezető anyagokra. 1985-ben az MTA levelező, majd 1990-től az Akadémia rendes tagjává választották.

Zawadowski professor mindig az elméleti szilárdtest-fizika legfontosabb kérdéseire koncentrált, munkássága jelentősen hozzájárult a nemzetközi fizikusközösség által is legérdekesebbnek tartott problémák megoldásához. A híg mágneses ötvözetekben fellépő Kondo-effektusra vonatkozó számításai alapozták meg nemzetközi hírnevét még a '70-es években. A töltéssűrűség-hullámok, illetve a kétnívós rendszerek területén publikált munkái hosszú időre meghatározták e kutatási területek fejlődését. Maradandót alkotott a szupravezetők és a mezoskopikus rendszerek elméleti vizsgálatában is. Zawadowski professor az általa művelt területeken új módszereket vezetett be, és új kutatási irányokat alapozott meg. Tudása és egyénisége mindig is vonzotta a tehetséges fiatalokat, generációkat nevelt fel, és indított el a tudományos pályán. Tanítványai közül mintegy tízen lettek az MTA hazai vagy külső tagjai, és közel húszra tehető azok száma, akik neves külföldi vagy hazai egyetemek professzorává váltak.

A hazai szilárdtest-fizika megalapozását jelentették a 70-es években az Eötvös Loránd Tudományegyetemen tartott kurzusai. Ezt követően több éven keresztül meghívott professzorként kutatott és tartott előadásokat olyan neves külföldi egyetemeken, mint a University of Virginia, Rutgers University, University of Illinois, valamint a University of California, Los Angeles.

A Műegyetem professzoraként és a Fizikai Intézet igazgatójaként 1992-től megszervezte a nemzetközi követelményeknek megfelelő mérnök-fizikus képzést, megalapította a MTA–BME Kondenzált Anyagok Fizikája Kutatócsoportot. Nevéhez fűződik a BME fizikus PhD-programjának létrehozása, a doktori képzés feltételeinek megteremtése. Meghatározó szerepet játszott a Fizikai Intézet korszerű kísérleti laboratóriumainak létrehozásában, a magas színvonalú szilárdtest-fizikai kísérleti kutatások egyetemi környezetben történő meghonosításában. Az általa tanított tárgyak – félvezetők fizikája, szilárdtest-fizika, soktestprobléma, elektrodinamika, kvantummechanika – sokrétűsége jól tükrözi széleskörű érdeklődését. A mezoszkopikus fizika területén indított előadás-sorozatával egyúttal új kutatási területet is kijelölt. Erre építve vált napjainkra a nanofizika elméleti és kísérleti vizsgálata a BME kiemelt, rendkívül sikeres kutatási területévé.

Munkássága elismertségét több díj, így Akadémiai Díj (1977), Állami Díj (1980), Alexander von Humboldt-díj (1996) és Széchenyi-díj (2003) is fémjelzi. A BME szenátusa 2017 májusában a Műegyetem legrangosabb kitüntetését, a József Nádor Emlékéremet adományozta Zawadowski Alfrédnek.

Iskolateremtő munkásságát és a nemzetközi tudományos életben betöltött szerepét jól mutatja, hogy a 80. születésnapja alkalmából tartott rendezvényre a világ minden részéről érkeztek volt tanítványai és munkatársai. A Zawadowski-iskolát bemutató tudományos workshopról a *Fizikai Szemle* 2016. májusi száma <http://fizikaiszemle.hu/arhivum/fsz1605/FizSzem-201605.pdf> számolt be.

Zawadowski professzort a Magyar Tudományos Akadémia és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem saját halottjának tekinti.

Mihály György gyászbeszéde

Sokan eljöttünk tanítványok, munkatársak, barátok és tisztelők, hogy búcsút vegyünk Zawadowski Alfréd-től, a világszerte elismert tudóstól.

Ő teremtette meg a korszerű szilárdtest-fizika hazai művelésének alapjait, nevéhez fűződik az elméleti és kísérleti kutatások szoros összekapcsolása, korábban nem művelt, új kutatási területek elindítása. Elismertségét és a tudományos életben betöltött szerepét jól mutatja, hogy a 80. születésnapjára Amerikától Németorszáig/Svájcig a világ minden tájáról érkeztek volt tanítványai és munkatársai, hogy Frédit köszöntsék.

Másfél évvel ezelőtt, születésnapján többen felidéztük a Zawadowski-iskola létrejöttének mozzanatait. Ennek meghatározó eleme volt az 1972/73-ban, ELTE-n tartott előadássorozat – amikor hosszú idő után megengedték Frédinek, hogy az egyetemen tanítson. A kurzus a felettünk járó évfolyamnak lett meghirdetve, de mi is bejártunk, és ott voltak a minket tanító egyetemi oktatók is. Egy teljesen más fizikát ismertünk meg, akkoriban felfedezett érdekes jelenségeket, modern elméleteket és új matematikai módszereket.

Néhány évvel később, többen már Frédi lakásában, a Galeotti utcában találtuk magunkat és a KFKI-ból kiviteli engedéllyel szerzett fekete tábla előtt igyekeztünk megérteni egy-egy éppen megjelent tudományos közleményt. Így utólag tudjuk már, hogy ezek a cikkek a modern szilárdtest-fizika fejlődési irányait kijelölő alapvető gondolatokat tartalmazták. Frédi iránymutatása meghatározó volt számunkra mind az elméleti, mind pedig a kísérleti témák kiválasztásában.

Frédi mindenkit ismert, aki a tudományterület vezető kutatója volt, és Frédit is világszerte ismerte mindenki. A tudomány nemzetközi, és csak nemzetközi szinten érdemes művelni. Miatta jöttek el Nobel-díjas fizikusok Magyarországra, vagy olyan elméleti és kísérleti fizikusok, akik néhány évvel/évtizeddel később kaptak Nobel-díjat. A KFKI-ban a 70-es és 80-as években egy Nyugat-Kelet találkozási pontot tudott létrehozni a világ vezető tudósai számára, és ebbe integrálódott a hazai Zawadowski-iskola. Számunkra ez akkor természetesnek tűnt, de most már tudjuk, hogy a sors kivételezetei voltunk.

Szerencsések azok, akik Frédi barátjának mondhatják magukat. Egy Los Angelesben együtt töltött év minket és családjainkat is közelebb hozott egymáshoz. Sok kaliforniai kirándulás vagy más közös program emlékét őrizzük családommal együtt ebből az időből, és ez a kapcsolat hazatérve is megmaradt. Megismerhettem Frédi sokszínű egyéniségét a mindennapi életben is. Megcsodálhattam például a profi módon kivitelezett házi barkácsolásának eredményét, amire legalább olyan büszke volt, mint valamelyik tudományos közleményére. Az élet minden területén lehetett tanulni tőle. Rengeteg embert ismert, kivételes történeteket tudott, és ezeket mindig érdekfeszítően mesélte el.

Befejezésül *Holczer Károly Fizikai Szemlében* írt mondatait szeretném idézni: „Frédi az életet, a fizikát, a fizika művelőit, az országot és mindent, ami körülvette úgy látta és formálta, ahogy csak kivételes emberek, elmék képesek. A cél a megértés, és az természetes, hogy a megértéshez vezető munkát el kell végezni. Ehhez a munkához a legjobb emberek kellenek és egy olyan környezet, amiben elvégezhető. Frédi fáradhatatlanul dolgozott ezen, ebben élt, teremtette saját igaz világát.”

Mi, munkatársai és barátai a jövőben is azon leszünk, hogy a Frédi által teremtett világ továbbéljen és a Frédi által képviselt szellemiségben működjön.

Kertész János gyászbeszéde

Zawadowski Fréditől búcsúzunk, a kiemelkedő tudóstól, akadémikustól, akit Nobel-díjasok tekintettek partnerüknek; a kiváló tanártól, aki sikeres kutatók nemzedékeit nevelte fel; a nagyszerű vezetőtől, akinek köszönhetően a Műegyetem Fizikai Intézete nemzetközi színvonalú tudományos és oktató központtá vált. És nehéz szívvel búcsúzunk a szeretetre méltó embertől.

Az élet nagy ajándékának tartom, hogy Frédi barátja lehettem. Személyiségének vonzása persze tudományos tekintélyéből is fakadt, de színes egyéniségének, érdeklődő, nyitott szellemének hatása alól nem tudta magát kivonni, aki ismerte.

Szorosabb kapcsolatunk egy „összeesküvés a jóra” jellegű vállalkozással kezdődött, amikor 1992-ben Frédi megpályázta a Műegyetem Fizikai Intézetének igazgatói állását, és biztatására én is pályáztam. Az új idők jeleként a dékán nem a régi igazgató megbízását hosszabbította meg, hanem a legalkalmasabbat, Frédit választotta. Ő pedig ragaszkodott hozzá, hogy én legyek a helyettese.

Ekkor elkezdődött egy csodálatos, építő korszak, amiben Frédi igazán elemében volt. Létrejött a modern műegyetemi fizikusképzés és a kapcsolódó doktori iskola, laboratóriumok létesültek és újultak meg, kiváló kollégák csatlakoztak, megalakult a Matematikai Intézet és a Természettudományi Kar. Mindezen fejlemények motorja Frédi volt. Persze számos nehézség akadt, kezdve azon, hogy mérnökkari dékánokat kellett meggyőzni, hogy legyen a Műegyetemen fizikusképzés, addig, hogy betörésbiztossá kellett alakítani az intézetet. Frédi céltudatossága, bátorsága és tekintélye legyőzte az akadályokat. Ha kellett, stratégiát dolgozott ki és órákig tárgyalt, ha kellett, felgyűrte az ingujját és napokig könyvtárat rendezett, vagy tárolót épített saját kezűleg az Elméleti Fizika Tanszéken. Küzdelmeiben mindig határozott volt és eltökélt – pedig ezzel nem csak barátokat szerzett magának –, de soha nem a saját érdekeit nézte.

Utálta a butaságot és az önzést. Fel tudott habo­ro­dni, de kitűnő humorérzékkel ki is gúnyolta, ha ilyes­mivel került szembe. Az első időben, amikor még a Természet- és Társadalomtudományi Karhoz tartoztunk, szemben ültem Frédivel a Kari Tanácson, néha nehéz volt nevetés nélkül megállni, amikor álkomoly arccal bólogatott a „posztmarxisták” hosszan előadott sületlenségeit hallgatva. Mondanom se kell, a posztmarxisták elnevezés is tőle származik. Szerette ugratni a barátait is, és ha sikerült a tréfa, remekül szórakozott. Története a moszkvai banánévéstől a KFKI-s héliumcsatáig mára a közös anekdotakincs részei.

A kilencvenes évek végére a körülmények romlottak, és Frédi úgy döntött, hogy lemond igazgatói megbízatásáról. Ez egyike volt élete számos, valamilyen pozícióról való lemondásainak. Erkölc­si kérdés­ként értelmezte ezeket a helyzeteket. Érdeklődésünkre, hogy nem lenne-e jobb maradni és valamilyen kompromisszumot keresni, csak annyit felelt: „Engem a papám így tanított.”

Valóban, az a polgári környezet, amelyből származott, meghatározó volt Frédi számára. Rendszer­füg­getlen erkölcsi tartása, tetteiben megnyilvánuló hazaszeretete ebben gyökerezett. Kiváló nyugati egyetemek szívesen fogadták volna professzorként, de ő úgy érezte, hogy itthon van feladata. Amerikai útjai során alkalma volt részletesen megismerni egy működő liberális demokráciát, aminek eszménye mellett mindig is elkötelezett volt. Az utóbbi időben a Magyarország sorsa fölött érzett aggodalom nyomasztotta. Ugyanakkor Ádámék hazatelepülésével utolsó éveiben meleg családi légkör és a folytatás ígérete vette körül. Jó, hogy ez még megadatott neki.

Kedves Frédi! Megőr­zünk a szívünkben és igyekszünk méltók lenni emlé­kedhez. Nyugodj békében!

Zaránd Gergely gyászbeszéde

Az a szomorú feladatom, hogy Frédi fiatalabb tanítványa nevében búcsúzzam röviden most tőle.

Azóta, hogy utolért Frédi letaglózó halálhíre, szüntelenül egy kép jár a fejemben. Az a mozaikkép, amit Frédi 80. születésnapjára készítettünk *Simon Feri* javaslatára, Frédinek ajándékképp. Ez a mozaikkép Fré­dit nagyon jellegzetes pillanatban mutatja. A képen Frédi tekintete tűnődő, de a szája szélén a mindannyiunk által jól ismert huncut mosoly sejlik. A kép eredeti, vágatlan verziójában talán még egy borospohár is volt Frédi kezében. Mi mindannyian így ismertük Fré­dit.

Ez a mozaikkép 3600 apró kis kockából áll össze, amelyek mindegyike egy-egy különálló fénykép. Ezeket a fényképeket – sok száz fényképet – Frédi tanítványai, barátai, munkatársai küldték a világ minden tájáról, és a képek őket vagy Fré­dit ábrázolják egy-egy fontos ünnepi vagy jellegzetes pillanatban.

Nem hiszem, hogy ennél a képnél, vagy annál a levéláradatnál, amit Frédi halálhíre váltott ki, lehet több méltatás Frédinek. De azt sem hiszem, hogy Frédi valóban elment közülünk. Ahogy Frédi mozaikképét sok apró kép hordozza, úgy hordozzuk mi is mindannyian Fré­di emlékét, munkáit, tanácsait és legfőképpen példáját.

Mert Frédi leginkább példájával tanított bennünket, tanítványait.

– Tanított először is, mint tudós, lényegre törő kérdéseivel, átfogó, legendás tudásával és hihetetlen intuíciójával.

– Tanított, mint barát és munkatárs, azzal a figyelemmel, amellyel mindannyiunk pályáját kísérte, és azzal a kifogyhatatlan humorral, amelyet megőrzött a legnehezebb helyzetekben is.

– És tanított, mint vezető, megingathatatlan etikusságával, becsületességével, tisztánlátásával és azzal a konok kitartással, amellyel utolsó erejéig küzdött minden jó ügyért.

Frédi minden tanítványa nevében hálát adok azért a törődésért, és figyelemért, amivel bennünket kísért, és azért a példáért, amit életével mutatott nekünk.

Köszönöm, hogy tanítványod és munkatársad lehettem.

XVI. **mnt** Nukleáris Technikai

ISSN 016325-7
9 770018 325008 17010

Sz i m p ó z i u m

Nukleáris tájékoztatás és tájékozódás

Fórumot biztosítunk a szakembereknek, kutatóknak, a szakma ifjabb művelőinek a műszaki- és tudományos eszmecserére, kapcsolatépítésre.

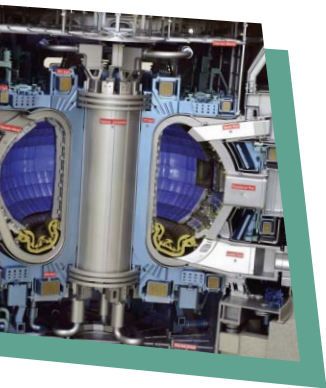
**KEDVEZMÉNYES
RÉSZVÉTEL
JELENTKEZÉSI
HATÁRIDEJE:
2017. OKTÓBER 20.**

KIEMELT TÉMÁINK:

1. radioaktív hulladékok és üzemanyagciklus zárása
2. nemzeti Nukleáris Kutatási Program újabb eredményei,
3. az új paksi blokkokhoz kapcsolódó előadások.

de várjuk az előadásokat az alábbi témakörökhöz kapcsolódóan is:

nukleáris technikák || új generációs reaktorok || fúziós technológia ||
vegyészet || hulladékkezelés || leszerelés és transzmutáció || reaktorfizika
|| termohidraulika || reaktoranyagok || nukleáris biztonság || informatikai
biztonság || sugár- és környezetvédelem || üzemeltetés és hatósági szabályozás
|| oktatás || PR és HR || új atomerőművi blokkok építése.



Idén is lehet pályázni a legjobb **poszter** díjra!

November 23-án, az A38 Hajó Éttermében vacsorára várjuk a résztvevőket.

November 24-én Kerekasztal beszélgetésre hívunk, illetve sajtótájékoztatót tartunk.

Minden érdeklődőt szeretettel várunk a XVI. Nukleáris Technikai Szimpóziumon!

Regisztrálni már most lehet: www.nuklearis.hu
(minden egyéb adat, információ a honlapon megtalálható)

**2017. NOVEMBER
23-24.**
GELLÉRT HOTEL, 1114 Budapest, Szent Gellért tér 2.

