

PÉCSI TUDOMÁNYEGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
FIZIKAI INTÉZET

**TERAHERTZES IMPULZUSOK TERJEDÉSÉNEK ÉS
KELTÉSÉNEK MODELLEZÉSE**



Témavezető: Dr. Tóth György
egyetemi docens

Készítette: Illés Gergő (HHU75J)
Fizika BSc

PÉCS, 2022

Tartalomjegyzék

I. Bevezetés	3
I.1. Motivációk nagy intenzitású terahertzes impulzusok előállítására	3
I.2. Terahertz generálás optikai egyenirányítással	4
I.3. Elektromágneses impulzusok leírása	5
I.3.1. Komplex reprezentáció	5
I.3.2. Elektromágneses impulzusok terjedése	6
I.3.3. Döntött frontú impulzusok leírása	8
II. Felhasznált eszközök	9
II.1. Matematikai modellek	9
II.2. Numerikus számolások MATLAB-ban	10
III. Numerikus eredmények	13
III.1. Keltési hatások	13
III.1.1. 500 femtoszekundumos pumpaimpulzus esete	14
III.1.2. 200 femtoszekundumos pumpaimpulzus esete	15
III.1.3. A számítások helyessége	15
III.1.4. Összehasonlítás	15
III.2. A THz-es impulzus alakjának és spektrumának alakulása	16
III.2.1. 500 femtoszekundumos pumpaimpulzus esete	16
III.2.2. 200 femtoszekundumos pumpaimpulzus esete	19
III.2.3. Összehasonlítás	21
III.3. A pumpaimpulzus csúcsintenzitásának hatása	22
III.3.1. Hatások összehasonlítása	22
III.3.2. THz-es impulzusok időbeli lefutása	23
III.3.3. Eredmények összefoglalása	25
III.4. A pumpaimpulzus időbeli hosszának hatása	26
III.5. Az impulzusfrontdöntés hatása	27
IV. Következtetések	28
IV.1. Visszahatás nélküli és visszahatásos modell	28
IV.2. Az eredmények gyakorlati jelentősége	28
IV.3. A modell egyéb felhasználási lehetőségei	29
IV.4. A modell továbbfejlesztése	29
Irodalomjegyzék	29
Köszönetnyilvánítás	31
Nyilatkozat	32

Kivonat

Az extrém térerősségű terahertzes impulzusoknak számos felhasználási területe lehet, ezek közül az egyik legígéretesebb a töltött részecskék gyorsítása. A szakdolgozat célja az optikai egyenirányítás során keletkező terahertzes impulzusok numerikus vizsgálata. 1D+1 számításokon keresztül vizsgáljuk a terahertzes impulzus és a pumpaimpulzus változását a keltés során, időbeli- és spektrális alakban. Először bemutatjuk a modellezett döntött impulzusfrontú gerjesztés módszerét, valamint bevezetjük az elektromágneses impulzusok matematikai modellben használt leírását. Ezután betekintünk a számolásokhoz használt kód legfontosabb részleteibe. Megvizsgáljuk a terahertzes visszahatás szerepét egy visszahatás nélküli- és egy visszahatásos modellen keresztül. Egyforma kezdeti feltételek mellett kapott eredményeket összehasonlítjuk. Megvizsgáljuk, hogyan változik a terahertz keltés hatásfoka illetve a terahertzes impulzusok időbeli lefutása a pumpaimpulzus intenzitásának függvényében. A dolgozatban vizsgáljuk továbbá a keltés hatásfokának, valamint az ideális kristályhossznak függését a pumpaimpulzus időbeli hosszának továbbá az elődöntés szögének függvényében. Az említett számítások során optimalizáljuk az elrendezés vizsgált paramétereit. A dolgozatban foglaltak tanulságosak lehetnek azoknak, akik lítium-niobátot használó elrendezés gyakorlati megvalósítását tervezik. A dolgozatban javaslatokat teszünk a pumpalézer intenzitására, Fourier-limitált impulzushosszára, a pumpaimpulzus elődöntésére, valamint a kristály méretére vonatkozóan.

I. Bevezetés

I.1. Motivációk nagy intenzitású terahertzes impulzusok előállítására

A nagy intenzitású terahertzes impulzusoknak számos felhasználási területe lehet [1–3]. A dolgozatban vizsgált döntött impulzusfrontú gerjesztés módszerével keltett egyciklusú terahertzes impulzusokat vizsgálom melyek például alkalmasak töltött részecskék gyorsítására [4]. A hatékony gyorsításhoz néhány mJ-os impulzusok lennének szükségesek, amely energia elérésére eddig csak néhány kutatócsoport volt képes. Ennek oka, hogy a mai elektronikai eszközöknek már a terahertzes tartomány túl magas, viszont az optikai keltési módszereknek túl alacsony frekvenciájú, ezért nem lehet egyik módszerrel sem nagy hatásfok mellett terahertzet generálni. A módszer amivel a legnagyobb impulzusenergiákat elő lehet állítani a szabadelektron-lézerek [5]. Ezeknek a berendezéseknek a hátránya a magas költség, és a nagy méret, ami miatt csak néhány kutatóintézetben rendelkeznek ilyen berendezésekkel. Az évek során lehetőség nyílt azonban 1 mJ feletti terahertzes impulzusok előállítására optikai egyenirányítás segítségével is [6].

I.2. Terahertz generálás optikai egyenirányítással

Időben nem sokkal a lézerek megjelenése után megfigyelték egyes kristályos anyagokban az optikai egyenirányítás jelenségét [7]. Az optikai egyenirányítást az anyag polarizációvektorának sorfejtésében a térerősség négyzetes tagja írja le:

$$\vec{P} = \vec{P}_0 + \underbrace{\varepsilon_0 \chi^{(1)} \vec{E}}_{\vec{P}^{(1)}} + \underbrace{\varepsilon_0 \chi^{(2)} \vec{E}^2}_{\vec{P}^{(2)}} + \dots \quad (1)$$

ahol

$$P_i^{(2)} = \varepsilon_0 \cdot \sum_{j,k=1}^3 \chi_{ijk}^{(2)} E_j E_k. \quad (2)$$

Az egyenletekben $\chi^{(2)}$ a elektromos szuszceptibilitás tenzora, $P^{(2)}$ a polarizációvektor, E_i a térerősségvektor i -edik komponense, ε_0 a vákuum permittivitása. Optikai egyenirányításra olyan anyagok alkalmasak, melyeknek a $\chi^{(2)}$ tenzorból származtatott effektív nemlineáris együtttható értéke magas. Ilyen anyag a lítium-niobát (LiNbO_3 ; továbbiakban LN) és a cink-tellurid (ZnTe) ami a két legelterjedtebb terahertz generálásra használt kristály.

Ahhoz hogy a terahertz generálása hatékony legyen teljesülnie kell az úgynevezett sebességillesztési feltételnek [8]:

$$v_{p,cs} = v_{THz,f} \quad (3)$$

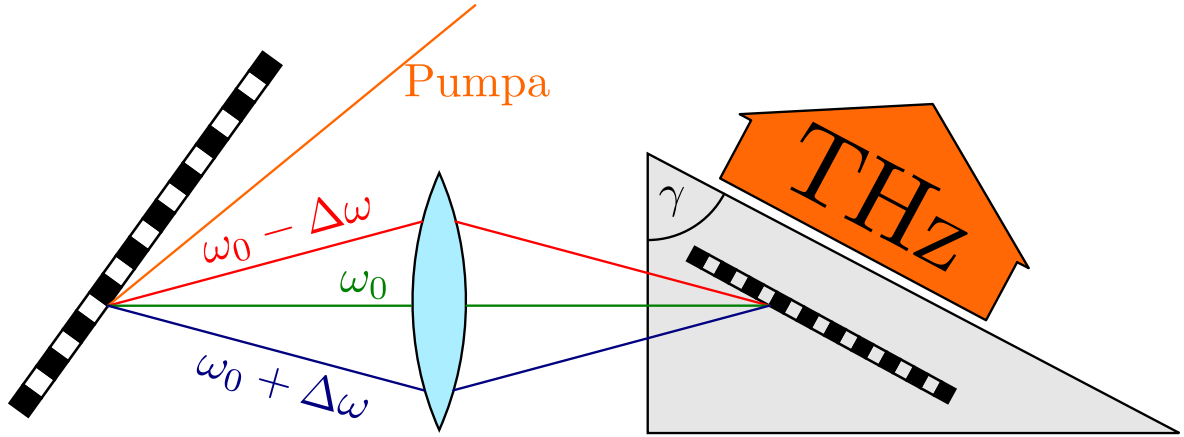
ami azt fejezi ki, hogy a pumpaimpulzus csoportsebességének meg kell egyeznie a terahertzes impulzus fázissebességével. Ez ZnTe esetén kollineáris pumpálás esetén teljesül, amennyiben 800 nanométeres központi hullámhosszú titán-zafír lézert használunk pumpálásra [9]. LN esetében azonban a sebességillesztés csak úgy teljesülhet, ha a pumpáló impulzus frontját megdöntjük, ekkor a sebességillesztési feltétel a következőképp alakul [8]:

$$v_{THz,f} = v_{p,cs} \cdot \cos(\gamma) \quad (4)$$

ahol γ az impulzusfront-döntés szöge. Törésmutatókkal kifejezve a sebességillesztési feltétel tehát:

$$n_{p,cs} = n_{THz,f} \cdot \cos(\gamma). \quad (5)$$

A numerikus eredmények fejezetben bemutatásra kerülő számítások a döntött impulzusfronttal gerjesztett lítium-niobát kristályt használó elrendezést modellezzik [10]. Az elrendezés sematikus rajzát az 1. ábra mutatja.



1. ábra: A döntött impulzusfrontú gerjesztési módszer vázlata [10]

A módszer használatakor első lépésként a pumpa impulzus frontját diffrakciós ráccsal döntjük. Ez lehet transzmissziós, vagy reflexiós rács is [11]. Ezután az impulzus jelentős mértékű szögdiszperzióval fog rendelkezni, amit azzal ellensúlyozunk, hogy egy az 1. ábrán egy lencse által szimbolizált leképzőrendszerrel a rács képét előállítjuk a kristály belsejében. Gyakorlatban ezt a leképzést úgy szokás megválasztani, hogy a pumpaimpulzus a kristály közepén legyen a lehető legrövidebb (azaz Fourier-limitált). Megjegyezzem, hogy a dolgozatban a számítások során a pumpaimpulzust a kristály belépő felületén választottuk Fourier-limitáltnak. A döntött impulzusfrontú pumpa a közegben haladva a frontjára merőlegesen kelti a THz-es teret.

A következő részben vizsgáljuk meg azt, hogy miként írhatók le az elektromágneses impulzusok.

I.3. Elektromágneses impulzusok leírása

Ebben az alfejezetben megvizsgáljuk, hogyan írhatók le az elektromágneses impulzusok, mit jelentenek az egyes törésmutatók, valamint, hogy az impulzusfront-döntés milyen hatással van a pumpáló impulzusra.

I.3.1. Komplex reprezentáció

Az elektromágneses impulzusok reprezentálhatók komplex alakban. A komplex alak használata célravezető, ugyanis ilyenkor értelmezhetővé válik az impulzus spektruma is. A komplex írásmód a következő:

$$E(z, t) = \text{Re} \left\{ \tilde{A}(z, t) \cdot \exp(i \cdot \omega_0 \cdot t) \right\} \quad (6)$$

ahol $E(z, t)$ a valós térerősség időbeli lefutása a tér egy z pontjában nézve, $\tilde{A}(z, t)$ a komplex térerősség burkoló ugyanezen pontban, ω_0 pedig az impulzus központi körfrekvenciája. A komplex térerősség burkoló fejlődését lineáris terjedés esetén a következő egyenlet határozza

meg:

$$\tilde{A}(z = L, \omega) = \tilde{A}(z = 0, \omega) \cdot \exp(-i \cdot k(\omega) \cdot L) \quad (7)$$

ahol $\tilde{A}(z = 0, \omega)$ a komplex térerősség burkoló Fourier-transzformáltja egy általunk választott pontban, $\tilde{A}(z = L, \omega)$ a komplex térerősség burkoló Fourier-transzformáltjának alakulása a kezdőponttól L távolságra, $k(\omega)$ pedig a hullámszám függvénye amit a következőképp definiálunk:

$$k(\omega) = \frac{n(\omega) \cdot \omega}{c} \quad (8)$$

ahol $n(\omega)$ az adott közeg törésmutatója, valamint c a vákuumbeli fénysebesség. Mivel $\tilde{A}(z, \omega)$ csak ω_0 valamely kis $\Delta\omega$ környezetében nem 0, ezért célszerű azt ω_0 körül felírni, amit az $\Omega = \omega - \omega_0$ helyettesítéssel teszünk. Az egyszerűség kedvéért vezessük be a $\varphi(\omega) = k(\omega) \cdot L$, fázis tagot. Ilyenkor az impulzus terjedését a következő egyenlet jellemzi:

$$\tilde{A}(z, \omega) = \tilde{A}(z = 0, \Omega) \cdot \exp(-i \cdot \varphi(\omega)) \quad (9)$$

Most vizsgáljuk meg $\varphi(\omega)$ Taylor-sorfejtését. A sorfejtés a következőképp alakul:

$$\varphi(\omega) = \varphi_0 + \left. \frac{d\varphi(\omega)}{d\omega} \right|_{\omega=\omega_0} \cdot \Omega + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\varphi(\omega)}{d\omega^2} \right|_{\omega=\omega_0} \cdot \Omega^2 \dots \quad (10)$$

A következőkben az egyes rendek hatását fogjuk vizsgálni kezdetben Fourier limitált, Gauss időbeli lefutású impulzusokat feltételezve, amit a következő alakban írunk fel:

$$E(z = 0, t) = E_0 \cdot \exp\left(-2 \ln 2 \cdot \frac{t^2}{\tau^2}\right) \cdot \cos(\omega_0 \cdot t + \phi_0) \quad (11)$$

ahol E_0 a csúcstérerősség, τ az intenzitás félérték szélessége, ϕ_0 pedig a kezdőfázis. Kiszámolva $\tilde{A}(z = 0, \Omega)$ -t a következőt kapjuk:

$$\tilde{A}(z = 0, \Omega) = E_0 \cdot \exp(i \cdot \phi_0) \sqrt{\frac{\pi}{2 \ln 2}} \cdot \tau \cdot \exp\left(-\frac{\Omega^2 \cdot \tau^2}{8 \ln 2}\right) \quad (12)$$

Most vizsgáljuk meg, hogy miként hatnak a (10) egyenletben lévő egyes tagok az impulzus alakjára. Ezt úgy tesszük, hogy a (12) egyenletet beírjuk a (9) egyenletbe úgy, hogy $\varphi(\omega)$ helyére csak az éppen vizsgált rendet helyettesítjük, majd az így kapott összefüggést inverz Fourier-transzformáljuk, végül pedig beírjuk a (6) egyenletbe.

I.3.2. Elektromágneses impulzusok terjedése

Elsőnek vizsgáljuk meg a 0-ad rend hatását. Az előbb leírt eljárást követően az alábbi összefüggést kapjuk a térerősségre:

$$E(z, t) = E_0 \cdot \exp\left(-2 \ln 2 \cdot \frac{t^2}{\tau^2}\right) \cdot \cos(\omega_0 \cdot t - \varphi_0 + \phi_0) \quad (13)$$

ami önmagában azt mutatja, hogy a burkoló időben nem változik, csak a \cos argumentumában lévő fázistag. Ezt a fázistagot a hullámszámmal kifejezve kapjuk:

$$E(z, t) = E_0 \cdot \exp \left(-2 \ln 2 \cdot \frac{t^2}{\tau^2} \right) \cdot \cos \left(\omega_0 \cdot t - \frac{n(\omega_0) \cdot \omega_0}{c} \cdot z + \phi_0 \right). \quad (14)$$

A \cos argumentumában lévő kifejezésből meghatározható a hullám fázisának a sebessége a következő egyenlet átrendezésével:

$$\omega_0 \cdot t - \frac{n(\omega_0) \cdot \omega_0}{c} \cdot z = 0 \quad (15)$$

amiből következik, hogy:

$$v_f = \frac{z}{t} = \frac{c}{n(\omega_0)}. \quad (16)$$

Ezt nevezzük fázissebességnek. Tehát az általános fázistag 0-ik rendje a hullám vivőjének fázisára hat.

Most vizsgáljuk meg hasonló módon az első rend hatását. A térerősség a következőképp alakul:

$$E(z, t) = E_0 \cdot \exp \left(-2 \ln 2 \cdot \frac{(t - \varphi'(\omega))^2}{\tau^2} \right) \cdot \cos(\omega_0 \cdot t + \phi_0) \quad (17)$$

Ez a tag felelős a burkoló haladásáért. Amennyiben végrehajtjuk a 0-ik rendnél használt helyettesítést $\varphi(\omega)$ -ba és az exponensben a deriválást elvégezve azt kapjuk, hogy:

$$E(z, t) = E_0 \cdot \exp \left(-2 \ln 2 \cdot \frac{\left(t - \frac{n'(\omega_0) \cdot \omega_0 + n(\omega_0)}{c} \cdot z \right)^2}{\tau^2} \right) \cdot \cos(\omega_0 \cdot t + \phi_0) \quad (18)$$

amiből meghatározható a térerősség burkolójának sebessége a következő egyenlet átrendezésével:

$$t - \frac{n'(\omega_0) \cdot \omega_0 + n(\omega_0)}{c} \cdot z = 0 \quad (19)$$

amit az előző szerint $\frac{z}{t}$ -re rendezve megkapunk egy haladási sebességet:

$$v_{cs} = \frac{z}{t} = \frac{c}{n(\omega_0) + n'(\omega_0) \cdot (\omega_0)} \quad (20)$$

amit csoportsebességnek nevezünk.

Végül pedig vizsgáljuk meg a második rend hatását az impulzus terjedésére. A térerősség

alakja ilyenkor a következő:

$$E(z, t) = \frac{1}{2} E_0 \tau \left(\frac{\tau^2}{16 \ln^2 2} + \frac{1}{4 \ln 2} \cdot \varphi''(\omega_0) \right)^{-\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{t^2}{\frac{\tau^2}{2 \ln 2} + 2 \cdot \varphi''(\omega_0)} \right) \times \cos \left(\omega_0 \cdot t + \frac{t^2}{\frac{\tau^4}{8 \ln^2 2 \cdot \varphi''}} + \frac{1}{2} \cdot \text{atan} \left(\frac{4 \ln 2 \cdot \varphi''}{\tau^2} + \phi_0 \right) \right) \quad (21)$$

A $\varphi''(\omega_0)$ kifejezés az úgynevezett csoportkésés-diszperzió, amit innentől GDD-vel jelölünk (angol: **Group Delay Dispersion**). A másodrend hatására az impulzus az előrehaladás során időben megnyúlik, az eltérő frekvenciájú komponensek időben elcsúsznak egymáshoz képest ami azt jelenti, hogy a vivő frekvencia nem állandó, valamint a csúcsintenzitás is lecsökken. A terahertz generálásnál használt döntött fronttal rendelkező impulzusok is rendelkeznek GDD-vel, aminek leírását a következő pontban tárgyaljuk.

I.3.3. Döntött frontú impulzusok leírása

Az optikai rácson való diffrakció következtében a különböző frekvenciájú komponensek eltérő irányba fognak terjedni, amit szögdiszperciónak nevezünk. A γ szöggel való döntés

$$\tan \gamma = \omega \frac{d\Theta(\omega)}{d\omega} \quad (22)$$

mértékű szögdiszperzióval jár együtt [12], ahol $\Theta(\omega)$ a diffrakció szöge a körfrekvencia függvényében. A szögdiszperzió következtében az impulzus csörpöltté (angol: „chirp”) válik aminek következtében megjelenik az előző részben tárgyalt $\varphi(\omega)$ fázis tagban a másodrendű komponens. A szögdiszperzió és a GDD közti kapcsolatot a következő egyenlet írja le [13]:

$$GDD \approx -\frac{\omega_0 \cdot L}{c} \cdot \left(\frac{d\Theta(\omega)}{d\omega} \Big|_{\omega=\omega_0} \right)^2 \quad (23)$$

ahol ω_0 az impulzus központi frekvenciája, L a rácstól megtett távolság. Mivel a terahertz generálás szempontjából a pumpaimpulzus intenzitása és időbeli hossza fontos paraméter ezért vizsgáljuk meg hogyan függ a GDD-től. A számítások során Gauss időbeli lefolyású impulzusokat feltételeztünk, aminek időbeli hossza az:

$$\tau = \tau_0 \sqrt{1 + \left(\frac{GDD \cdot 4 \cdot \ln(2)}{\tau_0^2} \right)^2} \quad (24)$$

egyenletnek megfelelően fog változni ahol τ az impulzushossz a vizsgált helyen, τ_0 az impulzus Fourier-limitált hossza. A csúcsintenzitás változását pedig a következő egyenlet írja

le:

$$I = I_0 \frac{\tau_0^2}{\sqrt{\tau_0^4 + (4 \cdot \ln(2) \cdot GDD)^2}} \quad (25)$$

ahol I az intenzitás a vizsgálat helyén, I_0 pedig a kezdeti intenzitás.

II. Felhasznált eszközök

II.1. Matematikai modellek

A pécsi terahertzes kutatócsoporton belül már korábban is végeztek számításokat terahertzes impulzusok keltésére vonatkozóan. Ezen számítások alapját a következő differenciál egyenlet képi [14]:

$$\frac{dE_{THz}(\Omega, z)}{dz} = -\frac{i\mu_0\Omega c}{2n_1} P_{NL}(\Omega) \exp(i\Delta k z) \quad (26)$$

ahol n_1 a közeg terahertzre vonatkozó törésmutatója $E_{THz}(\Omega, z)$ a keletkező terahertzes tér elektromos térerősségének Fourier-transzformáltja a körfrekvencia (Ω) és a keltési hossz (z), i az imaginárius egység,

$$\Delta k = k(\Omega) + k(\omega) - k(\Omega + \omega) \quad (27)$$

ami a sebességillesztetlenséget (phasemismatching) fejezi ki, ω a pumpaimpulzus körfrekvenciája, Ω a terahertzes impulzus körfrekvenciája valamint:

$$P_{NL}(\Omega) = \varepsilon_0 \chi^{(2)} \int_0^\infty E_{op}(\omega + \Omega) E_{op}^*(\omega) d\omega \quad (28)$$

ami a nemlineáris polarizáció. Fontos megjegyezni, hogy a modellben használt koordináta-rendszerben z a terahertzes impulzus haladási irányába mutat. Ezt a modellt szokás telítetlen pumpa közelítésnek is nevezni. A modell legnagyobb hibája az, hogy nem veszi figyelembe a keletkezett terahertzes jel visszahatását a pumpaimpulzusra, melynek mint látni fogjuk, drasztikus hatása lehet.

A modell, amely figyelembe veszi a visszahatást az előbbihez hasonló egyenleteken alapul, alakja a következő [15]:

$$\begin{aligned} \frac{dA_{THz}(\Omega, z)}{dz} = & -\frac{\alpha(\Omega)}{2} A_{THz}(\Omega, z) - i \frac{\Omega^2}{2c^2 k(\Omega)} \chi^{(2)} \\ & \times \int_0^\infty A_{op}(\omega + \Omega, z) A_{op}^*(\omega, z) \exp(-i[k(\omega + \Omega) - k(\omega) - k(\Omega)]z) d\omega \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned}
\frac{dA_{op}(\omega, z)}{dz} = & -i \frac{\omega^2}{2c^2 k(\omega)^2} \chi^{(2)} \\
& \times \int_0^\infty A_{op}(\omega + \Omega, z) A_{THz}^*(\Omega, z) \exp(-i[k(\omega + \Omega) - k(\omega) - k(\Omega)]z) d\Omega \\
& - i \frac{\omega^2}{2c^2 k(\omega)^2} \chi^{(2)} \\
& \times \int_0^\infty A_{op}(\omega - \Omega, z) A_{THz}(\Omega, z) \exp(-i[k(\omega - \Omega) - k(\omega) + k(\Omega)]z) d\Omega
\end{aligned} \tag{30}$$

ahol a (29) és (30) egyenletek egy csatolt differenciálegyenlet-rendszert alkotnak, amelyekben $A_{op}(\omega, z)$ és $A_{THz}(\Omega, z)$ az optikai impulzus valamint a terahertzes impulzus komplex spektrális amplitúdója és $\chi^{(2)}$ a LN terahertzre vett abszorpciója. Az elektromos térerősség spektruma és a komplex spektrális burkoló között a következő egyenlet teremt kapcsolatot:

$$E_{op}(\omega, z) = A_{op}(\omega, z) \cdot \exp(-i \cdot k(\omega) \cdot z) \tag{31}$$

$$E_{THz}(\Omega, z) = A_{THz}(\Omega, z) \cdot \exp(-i \cdot k(\Omega) \cdot z) \tag{32}$$

A számításokat úgy végeztük, hogy amikor visszahatás nélküli modellel számoltunk, a $\partial_z A_{op}(\omega, z) = 0$ kifejezést használtuk (30) helyett, ami azt jelenti, hogy az optikai impulzus lineárisan terjed a kristályon belül. Ilyenkor a két modell egymással ekvivalens.

II.2. Numerikus számolások MATLAB-ban

A differenciálegyenlet-rendszer megoldása negyed rendű Runge-Kutta módszerrel (RK4) történt amihez saját függvényt írtam, amit az 1. kódrészlet mutat be.

```

function varargout = RK4_M(f, step, t0, y0, t_final)
T=t0:step:t_final;
Y = zeros(length(T), size(y0,2), size(y0,3));
Y(1, :, :) = y0;
for ii = 2:length(T)
    k1 = f(T(ii-1), Y(ii-1, :, :));
    k2 = f(T(ii-1)+step/2, Y(ii-1, :, :)+k1*step/2);
    k3 = f(T(ii-1)+step/2, Y(ii-1, :, :)+k2*step/2);
    k4 = f(T(ii-1)+step, Y(ii-1, :, :)+k3*step);
    Y(ii, :, :) = Y(ii-1, :, :) + 1/6*(k1+2*k2+2*k3+k4)*step;
    disp(ii/length(T)*100);
end
if nargout == 1
    varargout{1} = Y;

```

```

elseif nargout == 2
    varargout{1} = T;
    varargout{2} = Y;
else
    error('Nem megfelelő számú kimenet! (1 vagy 2)');
end

end

```

1. kódrészlet: RK4 megoldó rutin

A függvény megírásánál szempont volt az, hogy igény szerint a megoldó visszaadja a független változót T (esetünkben ez a z), valamint az, hogy rugalmasan változtatható legyen a differenciálegyenlet formája, egészen addig, amíg két bemenete van. Ezt fel is használjuk a megoldás során. A saját megoldóra azért van szükség, mert a program alapjait képző megoldásokat később 2 dimenziós számítások elvégzésére szeretnénk használni, amire ez a kód könnyen átalakítható. Ilyen 2 dimenziós számításokra a MATLAB beépített megoldója (ode45) nem alkalmas, mert csak 1 dimenziós bemeneteket tud kezelni.

A megoldás másik fontos pontja maga a differenciálegyenlet-rendszer kezelése. Mivel a megoldó rutin egy függvényt kér, de a differenciálegyenlet-rendszer két függvényt tartalmaz, olyan függvényt kellett írni, ami csak egy darab függő és szintén egy darab független változót kér be. Erre a megoldás az volt, hogy a térerősség burkolók aktuális értékét egy kompozit változóba mentjük, amit maga a differenciálegyenletek függvénye fog szétbontani. Ez esetünkben azt jelenti, hogy y_0 kezdőérték egy olyan mátrix, amelynek nagysága az első dimenzió szerint 1, a második dimenzió szerint a mérete ω értékek számával egyenlő, a harmadik dimenzió szerint pedig 2. Ahhoz hogy a rendszer működhessen a differenciálegyenlet-rendszernek szintén ilyen változóval kell visszatérnie. A méretek választásánál szintén fontos volt, hogy a megoldás módszere esetleg más problémánál újra felhasználható legyen. Ezért az első dimenzió az aktuális z érték indexét tartalmazza, az utolsó dimenzió pedig magának a változónak a számát. Esetünkben a THz-re vonatkozó adat száma 1-es indexű, a pumpára vonatkozó 2-es. A számolások során használt kódot a 2. kódrészlet mutatja be.

```

function out = diffegy(z,A_kompozit,omega,T,k_omega,k_OMEGA,
    khi_eff,dnu,domega, visszahatas)
c = 3e8;
abszorpcio = aTHzo(omega,T);
ATHz = A_kompozit(1, :, 1);
Aop = A_kompozit(1, :, 2);
temp1 = zeros(size(ATHz));
[~, I] = max(abs(Aop));
for nagy_omega = 2:ceil(10e12/dnu)

```

```

temp1(nagy_omega) = -abszorpcio(nagy_omega)/2*ATHz(
    nagy_omega)-1i*khi_eff*omega(nagy_omega).^2/2/c^2/
    k_OMEGA(nagy_omega)*sum(Aop(nagy_omega:end-1).*conj(
    Aop(1:end-nagy_omega)).*exp(-1i*(k_omega(nagy_omega:
    end-1)-k_omega(1:end-nagy_omega)-k_OMEGA(nagy_omega))*
    z))*domega;
end
temp2 = zeros(size(temp1));
if visszahatas
    for kis_omega = I-1000:I+1000
        temp2(kis_omega) = -1i*khi_eff*omega(kis_omega).^2/2/
            c^2/k_omega(kis_omega)*(sum(Aop(kis_omega:end-1).*
            conj(ATHz(1:end-kis_omega)).*exp(-1i*(k_omega(
            kis_omega:end-1)-k_omega(kis_omega)-k_OMEGA(1:end-
            kis_omega))*z))+sum(Aop(kis_omega:-1:1).* (ATHz(1:
            kis_omega)).*exp(-1i*(k_omega(kis_omega:-1:1)-
            k_omega(kis_omega)+k_OMEGA(1:kis_omega))*z)))*
            domega;
    end
end
out = zeros(1,length(omega),2);
out(1,:,1) = temp1;
out(1,:,2) = temp2;
end

```

2. kódrészlet: Differenciálegyenletek kezelése

A differenciálegyenlet rendszerben A_{op} és A_{THz} megváltozását nem számoljuk ki az összes felvett ω és Ω értékre. A nagy_omega és a kis_omega indexek csak egy olyan kisebb tartományon mennek végig, ahol a komplex spektrumok megváltoznak, ezzel a futás idejét lehet nagy mértékben csökkenteni. Az intervallumokat úgy választottam meg, hogy először az összes ω és Ω értékre elvégeztem a számításokat, majd a végén kiválasztottam egy olyan tartományt mindkét változó esetén a tartományon belül, hogy a változás nagy biztonsággal 0 körül legyen. Ezt minden számolás után le is ellenőriztem. A másik dolog az, hogy ez a függvény nem két változós ahogy láthatjuk, ezért a scripten belül egy név nélküli függvény segítségével tesszük két változóssá úgy, hogy az állandókat megadjuk. Ezt követően már meghívható rá a megoldó. A kódot a 3. kódrészlet mutatja be.

% kezdő komplex térerősségek összeillesztése

```

A_komp(1,:,1) = ATHz;
A_komp(1,:,2) = Aop0;

```

%% diffegyenlet létrehozása

```
v6_fgv = @(z,A_kompozit) diffegy(z,A_kompozit,omega,T,k_omega,  
    k_OMEGA,khi_eff,dnu,domega,visszahatas);
```

%% diffegyenlet megoldása

```
[z,A_komp] = RK4_M(v6_fgv,dz,0,A_komp,z_vegso);  
ATHz = A_komp(:, :, 1) .';  
Aop = A_komp(:, :, 2) .';  
clear('A_komp');
```

3. kódrészlet: Az RK4 megoldó és a differenciálegyenletek összeillesztése

A megoldó lefutása után újra szétválasztjuk a változókat, majd az eredeti kompozit változó törlésre kerül, hogy ezzel memóriát szabadítsunk fel. Mivel a megoldó úgy van kódolva, hogy visszaadja az összes lépés eredményét a vele összetartozó független változóval együtt, elég egyszer futtatni, amennyiben megfelelő nagyságú volt a lépésköz és a megoldás megbízható. Ez megkönnyíti és meggyorsítja az eredmények feldolgozását. Ezután a feldolgozáshoz szükséges adatok mentésre kerülnek a MATLAB saját „mat” formátumába, ami előnyös, mert így a változók névvel kerülnek mentésre, és egy másik script-tel betöltve jól kezelhetők. Ezt ki is használjuk, amikor a kiértékelést végezzük. A görbéket képző adatokat szintén a MATLAB segítségével dolgozzuk fel. A grafikonok adatai „txt” fájlalba kerülnek mentésre, melyből a dolgozatba is bekerült grafikonok végül Origin segítségével készülnek el.

III. Numerikus eredmények

A következőkben megvizsgáljuk a visszahatásos és a visszahatás nélküli modell által kapott eredményeket kitérve az elérhető legnagyobb hatásfokra, az ahhoz tartozó kristályhosszra, THz-es és a pumpaimpulzus spektrálisan valamint időben való változására. A számításokban 500- és 200 femtoszekundum intenzitás félérték-szélességű pumpaimpulzusokat feltételeztünk $20 \frac{\text{mJ}}{\text{cm}^2}$ -es fluxussal, ez az 500 femtoszekundumos pumpaimpulzus esetén $40 \frac{\text{GW}}{\text{cm}^2}$ csúcsintenzitást valamint 200 femtoszekundumos impulzusra $100 \frac{\text{GW}}{\text{cm}^2}$ csúcsintenzitást jelent. További paraméterek a sebességillesztési frekvencia ami esetünkben 0,5 THz, a pumpálás központi hullámhossza 1030 nm, valamint a kristály hőmérséklete 100 K.

III.1. Keltési hatásfok

Először hasonlítsuk össze a két modellt a hatásfokok tekintetében. Az eredmények az előbb leírt 500- és 200 femtoszekundumos pumpaimpulzusok esetén külön kerülnek tárgyalásra.

A hatásfokot a következőképp definiáltuk z helyen:

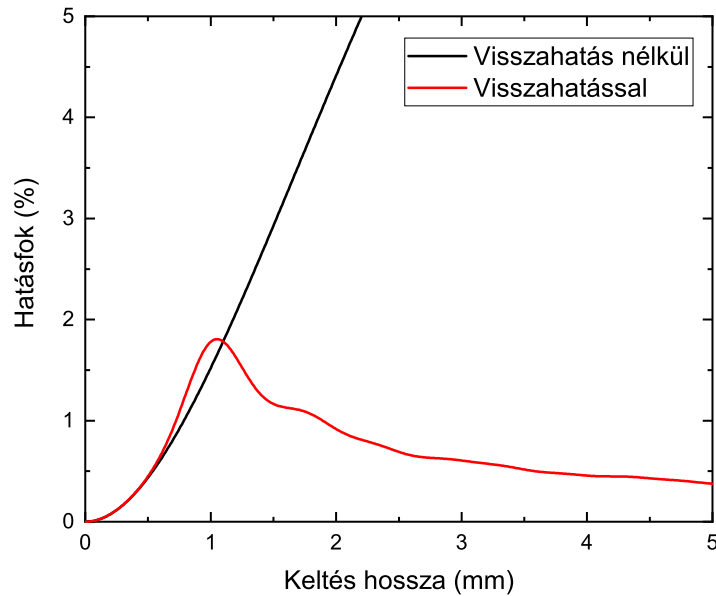
$$\eta = \frac{W_{THz}(z)}{W_{pumpa}(z=0)} = \frac{\int I_{THz}(\Omega, z) d\Omega}{\int I_{op}(\omega, z=0) d\omega} \quad (33)$$

ahol η a hatásfok, W_{THz} a keltett terahertzes impulzus energiája, W_{pumpa} pedig a pumpaimpulzus energiája a kristályon belül. Ezen hatásfok a komplex spektrális burkolóval a következőképp írható fel:

$$\eta = \frac{\int |A_{THz}(\Omega, z)|^2 d\Omega \cdot n(\Omega_0)}{\int |A_{op}(\omega, z=0)|^2 d\omega \cdot n(\omega_0)}. \quad (34)$$

III.1.1. 500 femtoszekundumos pumpaimpulzus esete

Először hasonlítsuk össze az 500 femtoszekundumos pumpa esetén a hatásfokokat. A hatásfokok alakulását z függvényében a 2. ábra mutatja be:

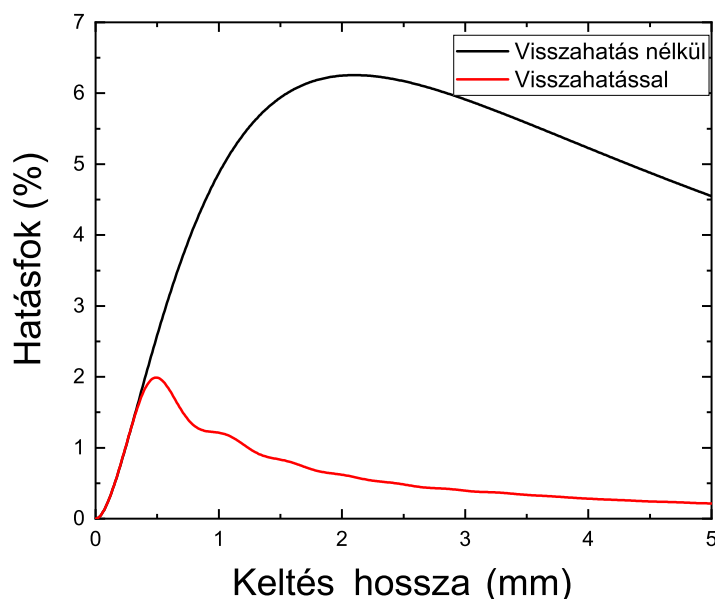


2. ábra: Hatásfokok alakulása 500 femtoszekundumos pumpaimpulzus esetén

Az ábrán látható, hogy nagyjából 0,5 milliméteres keltési hosszon a két modell nem tér el jelentős mértékben. A visszahatásos modell 1,05 milliméternél éri el az 1,8%-os maximális hatásfokot. Ezt követően a két modell által kapott eredmények jelentősen eltérnek egymástól. Amennyiben a visszahatást nem vesszük figyelembe, a maximális hatásfok 10% fölé emelkedik 6 milliméteres keltési hossz esetén. Már ezen a példán is jól látható a két modell közti eltérés. Optikai egyenirányítással 2% feletti hatásfokot még sosem tapasztaltak. Ezen túlmenően a kísérletekben is az a tapasztalat, hogy a legnagyobb hatásfokot a prizma csúcsánál lehet kimérni, mely összhangban van azzal, hogy a rövid keltési hosszon lehet elérni nagyobb hatásfokot. Ezek az empirikus úton történt megállapítások egyértelműen alátámasztják a visszahatásos modell pontosságát.

III.1.2. 200 femtoszekundumos pumpaimpulzus esete

Megvizsgáltam, hogy 200 femtoszekundumos pumpálás esetén mennyiben térnek el egymástól a hatásfok görbék. Az eredményeket a 3. ábra mutatja be.



3. ábra: Hatásfok alakulása 200 femtoszekundumos pumpaimpulzus esetén

Az előző esethez hasonlóan a két modell hatásfok tekintetében megegyezik 0,5 milliméterig. Ebben az esetben viszont a hatásfok maximuma a visszahatást figyelembe véve 2% amit 0,5 milliméternél ér el. Amennyiben eltekintünk a visszahatástól a maximális hatásfok 6,25% amit 2,1 milliméternél ér el. Ebben az esetben a visszahatás nélküli modell jobb közelítést ad, mint 500 femtoszekundumos pumpálás esetén azonban a különbség így is háromszoros.

III.1.3. A számítások helyessége

A matematikai modell forrásaként használt cikkben [15] közölt hatásfokra vonatkozó számítások ugyanezen paraméterek mellett készültek, és az általunk végzett számítások összhangban vannak. Kis eltérések adódhatnak abból, hogy a cikkben eltérőek voltak az abszorpciót és a törésmutatót leíró függvények, valamint abból, hogy ezen számítások nem vették figyelembe a pumpaimpulzusra vonatkozó abszorpciót. Ez arra enged következtetni, hogy az általunk végzett számítások helyesek.

III.1.4. Összehasonlítás

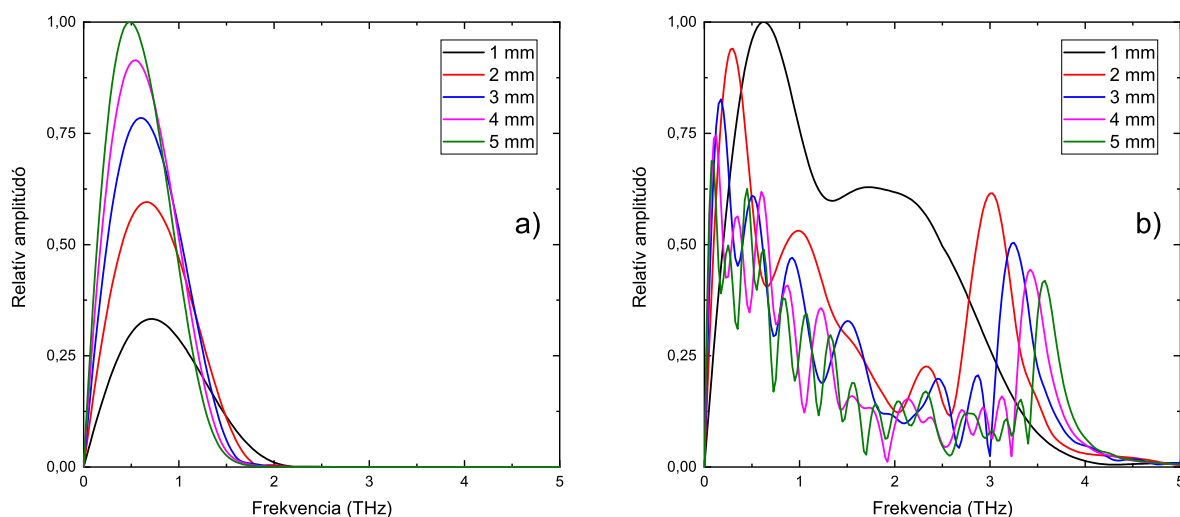
Mindkét hosszúságú pumpaimpulzus esetén azt tapasztaljuk, hogy a visszahatás nagymértékben befolyásolja a hatásfok alakulását. A hatásfok maximum értéke közel azonos amennyiben 500- és 200 femtoszekundumos pumpaimpulzust választunk, viszont a maximum helye

nagyjából fél millimétert tolódott. Gyakorlati szempontból ez fontos lehet, mert vastagabb kristályok előállítása, illetve kísérleti elrendezésekben történő használata lényegesen egyszerűbb, ezért a pumpaimpulzus hosszának változását részletesebben is megvizsgáljuk. Pusztán a keltési hatások alapján nem állapítható meg, hogy használhatóak-e a keletkező terahertzes impulzusok. Ezen kérdés eldöntéséhez vizsgáljuk meg a terahertzes impulzusok spektrumát valamint a térerősségek időbeli lefutását. Mivel a pumpaimpulzus is megváltozik a visszahatás következtében, ezért annak a változását is nyomon követjük.

III.2. A THz-es impulzus alakjának és spektrumának alakulása

III.2.1. 500 femtoszekundumos pumpaimpulzus esete

A következőkben összehasonlítjuk a két modellel számított terahertzes spektrumokat és időbeli alakokat. A 4.a ábra mutatja a visszahatás nélküli modellel 500 femtoszekundumos pumpálás esetén keletkező terahertzes impulzus spektrumát különböző kristályhosszak esetén. A 4.b ábra ugyanezen görbéket mutatja be a visszahatásos modellel számolva.

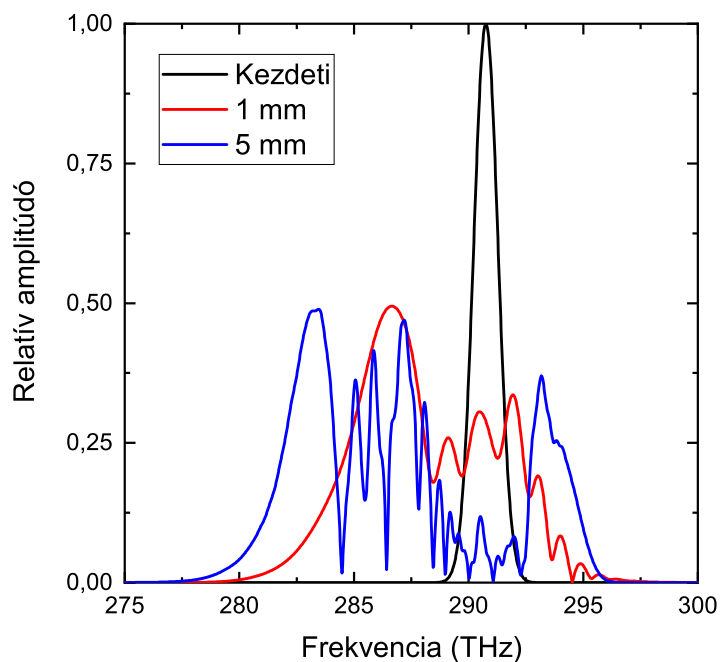


4. ábra: THz-es spektrum alakulása a kristályban való mélység függvényében:
a) visszahatás nélkül, b) visszahatással

A visszahatás nélküli (4.a) esetben azt látjuk, hogy az előrehaladás során a terahertzes spektrum növekszik és egyre keskenyedek, valamint nem láthatóak felharmonikusok, vagy szatellit csúcsok. A másik dolog amit megfigyelhetünk az, hogy a spektrum csúcsa tolódik az alacsonyabb frekvenciák felé. Ennek két oka van, az egyik, hogy az impulzusfront döntés miatt a pumpaimpulzus egyre hosszabbá válik a terjedés során így a keltett terahertzes jel hullámhossza is hosszabbá válik. A másik, hogy a LN abszorpciója a magasabb frekvenciákra nagyobb, így a csúcs lefelé tolódik.

A visszahatásos (4.b) esetben azt látjuk, hogy a spektrum sok helyi maximummal rendelkezik, valamint szélesedik a haladás következtében. Ahhoz, hogy meg tudjuk magyarázni

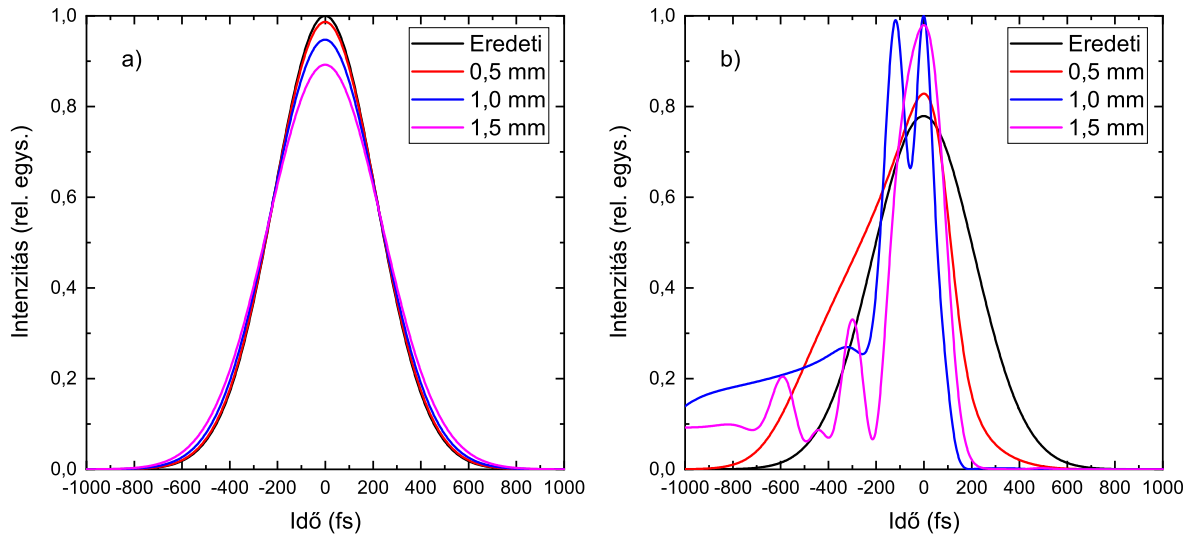
ennek az okát tekintsük a pumpaimpulzus spektrumának változását az időben, melyet az 5. ábra mutat be.



5. ábra: A pumpaimpulzus spektrumának változása az előrehaladás folyamán

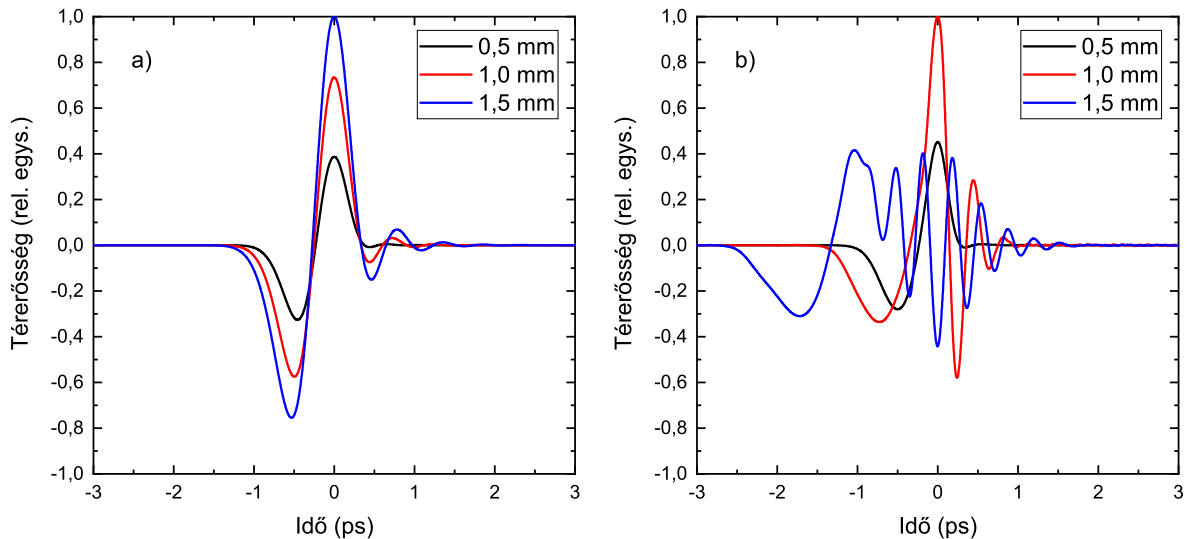
Az ábrán látható, hogy a haladás során a pumpa spektruma kiszélesedik, valamint eltolódik első sorban az alacsonyabb frekvenciák felé. Mivel a keletkező terahertzes komponensek a pumpaimpulzusban lévő frekvenciák különbségéből erednek, amennyiben a pumpa spektruma szélesedik, magasabb frekvenciák keltődhetnek. A pumpa spektrális eloszlása azonban nem stabil, folyamatosan változik, így a magasabb frekvenciáknál a terahertzes spektrum modulálttá válik.

Érdeemes megvizsgálni az időbeli alakok változását is. A 6. ábra mutatja be a pumpaimpulzus időbeli intenzitását visszahatás nélküli (6.a) és visszahatást figyelembe vevő (6.b) esetben.



6. ábra: Pumpa intenzitásának alakulása különböző kristályhosszak esetén:
a) visszahatás nélkül, b) visszahatással

Amikor nem vesszük figyelembe a visszahatást, a jól ismert lineáris terjedésre jellemző dolgokat tapasztaljuk: az impulzus hossza megnő, intenzitása csökken. Ezzel szemben a másik modell esetében azt tapasztaljuk, hogy az intenzitás megnő, valamint az impulzus időben összemegegy. Ez összhangban van a spektrális kiszélesedéssel, és magyarázza azt a jelenséget is, hogy bizonyos esetekben a visszahatásos modell nagyobb hatásfokot ad vissza mint a visszahatás nélküli (lásd pl.: 2. ábra). A spektrum és a hatásfok alapján arra számíthatunk, hogy az ideális THz-es impulzus alakot 1 milliméter körüli kristályhossz esetén kapjuk.



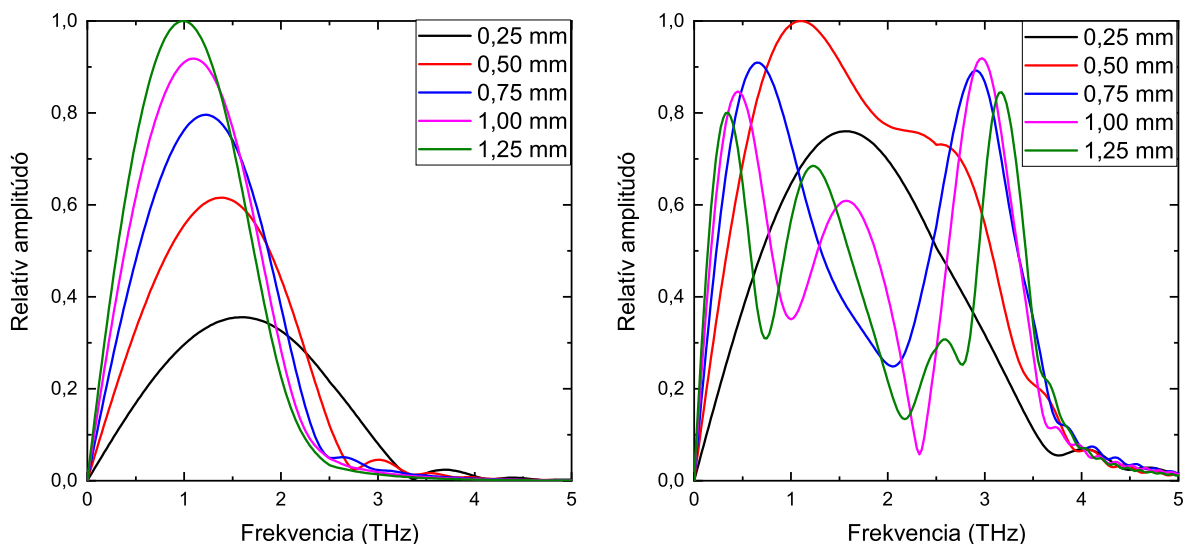
7. ábra: THz-es térérősségek időbeli lefutása egyes mélységeken:
a) visszahatás nélkül, b) visszahatással

Az időbeli alakokból, melyeket a 7. ábrán mutatok be, az látható, hogy 0,5 milliméteres kristályhossz esetén a térérősség időbeli lefutása egy ciklusú és szabályosnak mondható mindkét modell esetén. 1 milliméternél a visszahatásos modell esetén a térérősség nagyobb

mértékben nőtt mint a másik esetben. Ezen túlmenően az is látszik, hogy az impulzusoknak megszűnik az egy szinusz jellege és az impulzus végén kisebb oszcillációk jelennek meg. A visszahatásos modell esetén a terahertzes impulzus erősen csörpöltté válik. 1,5 milliméternél a visszahatás nélküli modell további növekedést és szép impulzusalakot jósol, a bonyolultabb modell esetében viszont már a térerősség maximuma lecsökken és több optikai ciklus jelenik meg. Ez alapján azt mondhatjuk, hogy az impulzusalak a keltési hatások maximuma körül a legkedvezőbb. Vizsgáljuk meg ezen hatásokat 200 femtoszekundumos pumpálás esetén is.

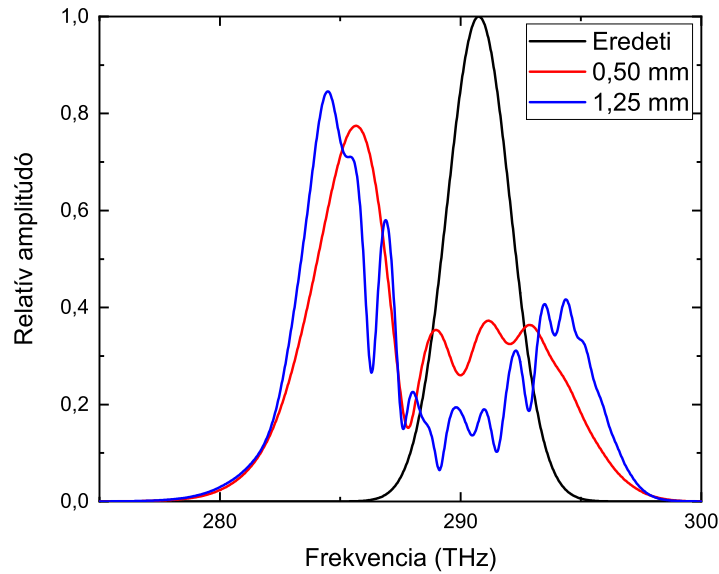
III.2.2. 200 femtoszekundumos pumpaimpulzus esete

Mivel az előző tapasztalatok azt mutatták, hogy az ideális impulzusalak a hatásfok maximumához tartozó kristályhossz körül várható, és 200 femtoszekundum esetében a hatásfok maximuma 0,5 milliméternél van, ezért ebben az esetben 0,25 milliméterenként haladva vizsgáljuk meg a visszahatás nélküli és visszahatásos modellel kapott spektrumokat valamint impulzusalakokat. A spektrumokat a 8. ábra mutatja be.



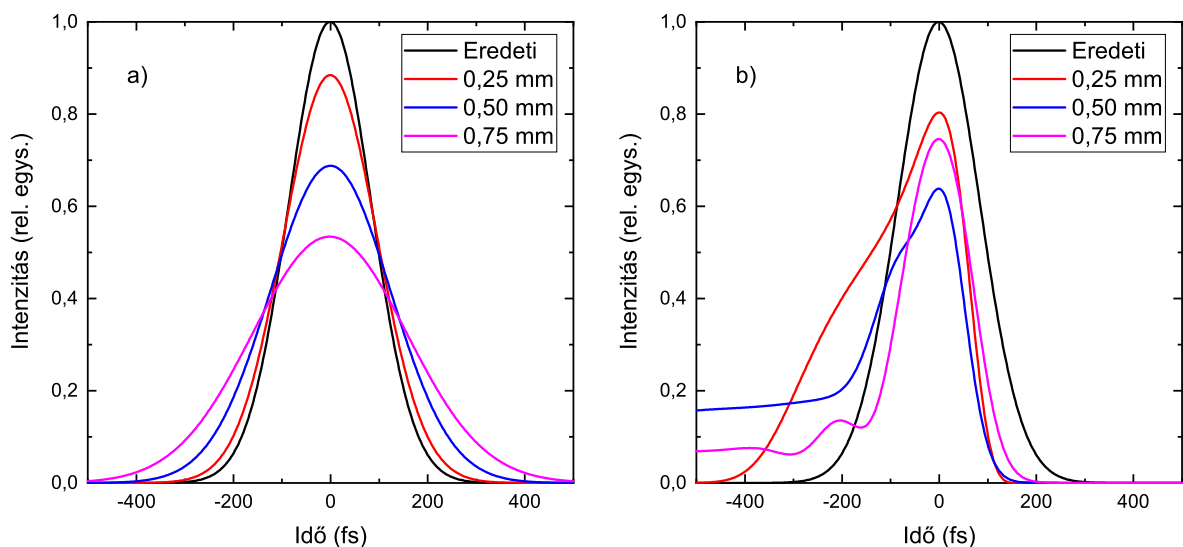
8. ábra: THz-es spektrum alakulása a kristályban való mélység függvényében:
a) visszahatás nélkül, b) visszahatással

A 8. ábrát megfigyelve az 500 femtoszekundumos pumpa esetéhez hasonló viselkedést látunk. Míg a visszahatás nélküli modell (8.a) során a terahertzes jel spektrumának maximuma növekszik, és a spektrum a maximuma a kisebb frekvenciák felé tolódik. A visszahatásos modellel kapott eredményt mutató grafikonon (8.b) rövid kristályhosszak esetén a spektrum alakja hasonlít a visszahatás nélkül kapott spektruméra ugyanazon kristályhossz esetén. A hatásfok maximumának elérésekor a terahertzes spektrum torzulni kezd. A maximum helyétől tovább távolodva azt tapasztaljuk, hogy 3 terahertz körül további lokális csúcsok is megjelennek a spektrumban, amelyek meghaladják az alacsonyabb frekvenciánál található csúcsokat.



9. ábra: A pumpa spektrumának változása az előrehaladás folyamán

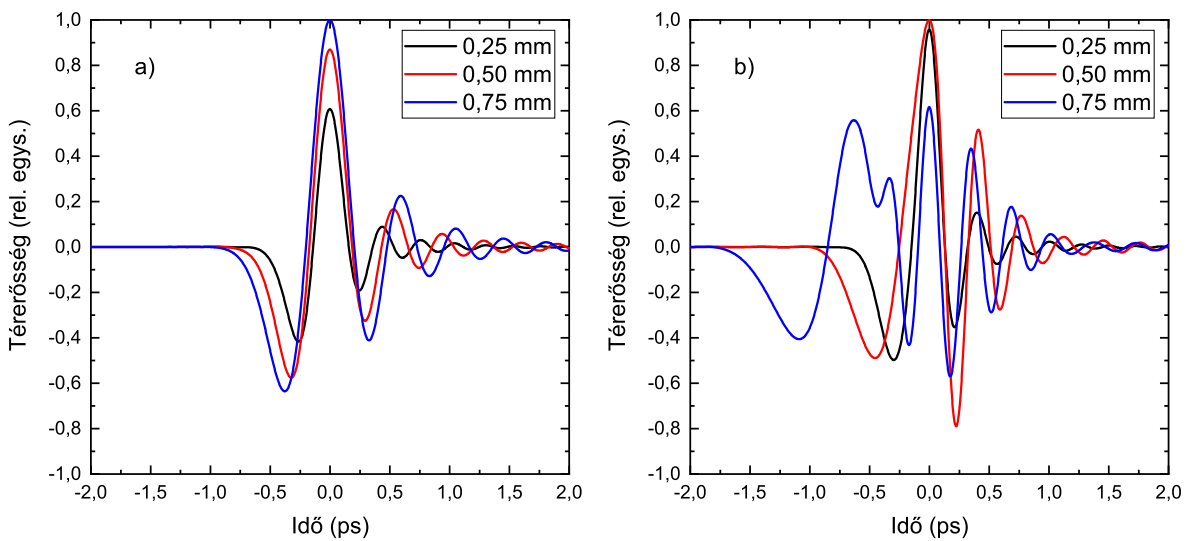
Az 500 femtoszekundumos esethez hasonlóan azt tapasztaljuk, hogy a pumpaimpulzus spektruma eltolódik elsősorban az alacsonyabb frekvenciák felé, valamint nagy mértékben kiszélesedik. 0,5 milliméteres kristályhossz esetén még felfedezhető a pumpaimpulzus alacsonyabb frekvenciájú tartományán a kezdő Gauss spektrum. 1,25 milliméternél azonban a pumpaimpulzus spektruma tovább torzul, és ez után teljesen szabálytalanná válik, ami az 500 femtoszekundumos esethez hasonlóan nagy mértékű modulációt eredményez a keltett terahertzes spektrumban. Megvizsgáltam ebben az esetben is a pumpaimpulzus intenzitásának időbeli alakulását. A számolás eredményeit a 10. ábra mutatja be.



10. ábra: Pumpa intenzitásának alakulása különböző kristályhosszak esetén:
a) visszahatás nélkül, b) visszahatással

A visszahatás nélküli modellel (10.a) a lineáris terjedésnek megfelelően viselkedik az impulzus. Az 500 femtoszekundumos esettel összehasonlítva az impulzus gyorsab-

ban nyúlik meg, ami összhangban van a bevezetőben tárgyaltakkal. A visszahatásos modell esetén azt látjuk, hogy az intenzitás maximuma a kristályban való haladás elején gyorsabban csökken, majd 0,50 milliméter és 0,75 milliméter között ismét növekszik. A másik tapasztalat pedig az, hogy az intenzitás időbeli szélessége is csökken. Ez összhangban van a spektrum kiszélesedésével, valamint azzal, hogy a terahertzes spektrumban magas frekvenciájú csúcsok jelennek meg. Az 500 femtoszekundumos pumpálás esetével ellentétben itt nem tapasztaljuk azt, hogy az intenzitás maximuma a kiindulási maximum fölé nőne. Ezzel megmagyarázható az, hogy a 200 femtoszekundumos pumpálás esetén miért nem növekszik gyorsabban a keltési hatások a visszahatásos modellel kapotthoz képest, amit 500 femtoszekundumnál tapasztaltunk.



11. ábra: THz-es térerősségek időbeli lefutása egyes mélységben:
a) visszahatás nélkül, b) visszahatással

Hasonlóan az 500 femtoszekundumos esethez itt is az látható, hogy a hatások maximumának eléréséig a keletkező THz-es impulzusok közel egy ciklusúak, azonban a maximum után több ciklus is megjelenik, és a térerősség maximuma leesik. Az 500 femtoszekundumos esettel összehasonlítva 200 femtoszekundumos pumpaimpulzus esetén már a hatások maximumban vett THz-es impulzusoknak több ciklusa van.

III.2.3. Összehasonlítás

Az eddig bemutatott numerikus eredmények alapján azt mondhatjuk, hogy kis kristályhosszak esetén ($z \leq 0,25$ mm) a visszahatásból eredő különbség nem jelentős. Viszont az ilyen numerikus modellek célja az, hogy egy valós elrendezést optimalizáljunk, ahol általában az elérhető legnagyobb hatásfokot valamint legkedvezőbb impulzusalakot szeretnénk megtalálni. Ilyenkor viszont a két modell nagy mértékben eltér egymástól. Amennyiben nem vesszük figyelembe a visszahatást 3-5-szörös maximális hatásfokot kapunk, mindezt

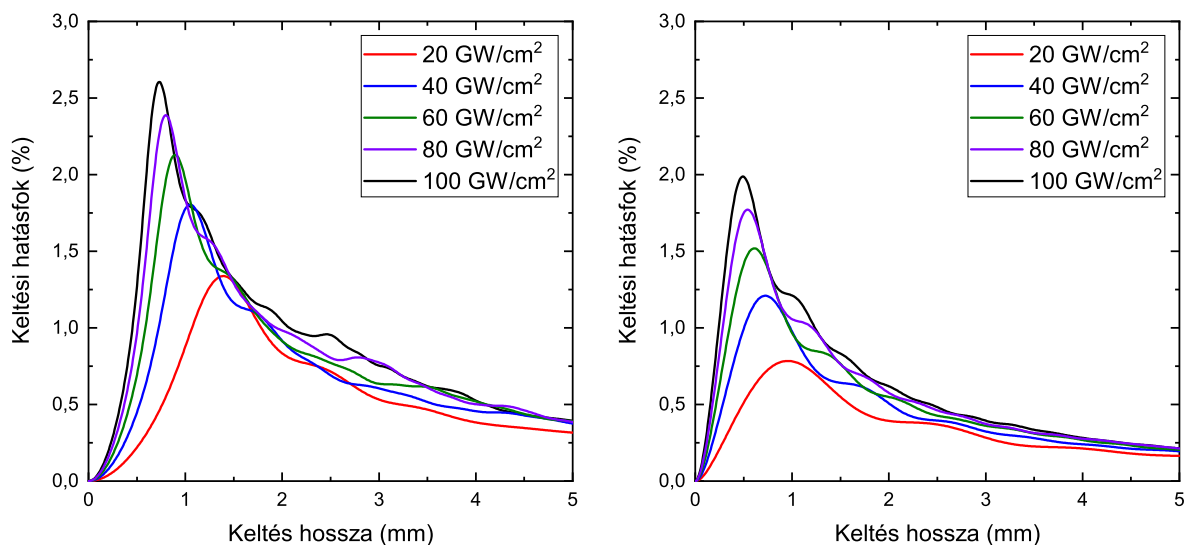
4-6-szoros kristályhossz esetén. Felhasználás szempontjából nem csak az impulzusok energiája fontos, hanem az is, hogy milyen a térerősségek lefutása.

III.3. A pumpaimpulzus csúcsintenzitásának hatása

A továbbiakban csak a visszahatásos modellel kapott eredményeket fogom részletesen bemutatni melyek tanulságosak lehetnek terahertzes források építésénél. A pumpaimpulzusokat továbbra is 500- és 200 femtoszekundumosnak választjuk, mivel a gyakorlatban használt nagy teljesítményű 1030 nm-es lézerek tipikusan ilyen impulzushosszakal rendelkeznek. Intenzitás szempontjából 20- és 100 $\frac{\text{GW}}{\text{cm}^2}$ közti értékeket választunk. Ezen intenzitás a tapasztalatok szerint még 500 femtoszekundumos impulzushossz esetén sem vezet a kristály roncsolódásához.

III.3.1. Hatásfokok összehasonlítása

Először hasonlítsuk össze, hogy a hatásfok görbéi hogyan változnak 200- és 500 femtoszekundumos pumpaimpulzus esetén. A számítás eredményeit a 12. ábra mutatja be.



12. ábra: A hatásfok alakulása különböző intenzitású pumpaimpulzusok esetén:
 a) 500 femtoszekundumos pumpaimpulzus, b) 200 femtoszekundumos pumpaimpulzus

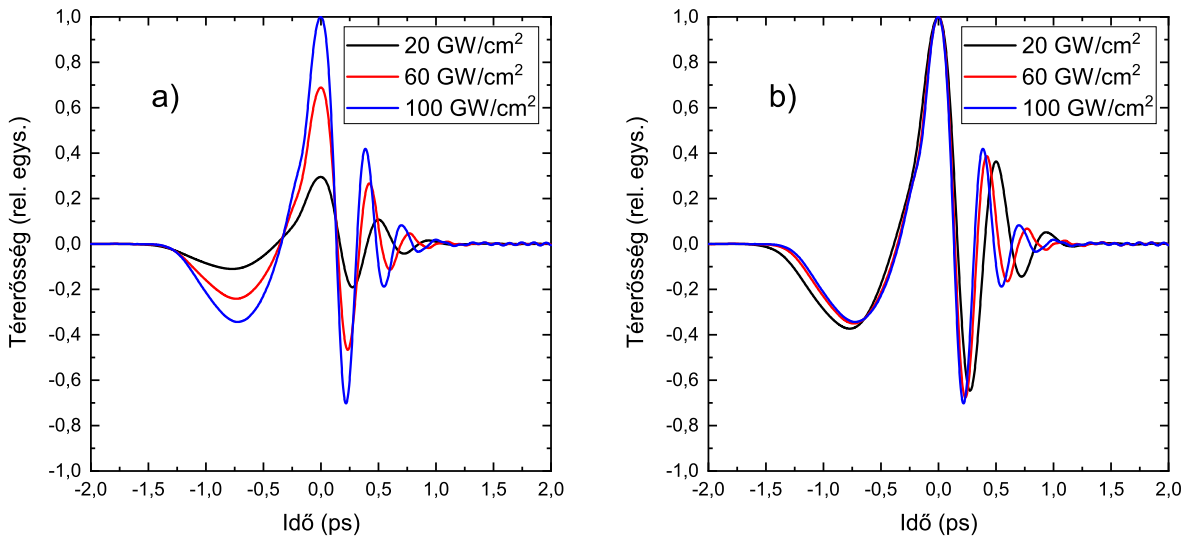
A számítások alapján az általunk választott sebességillesztési frekvencia mellett, 500 femtoszekundumos pumpaimpulzusok használata esetében nagyobb hatásfok érhető el azonos intenzitás mellett mint a 200 femtoszekundumos pumpaimpulzusok használata mellett. Fontos hozzátenni azt, hogy nagy intenzitások esetén a LN kristály többfotonos abszorpciója már nem hanyagolható el. A többfotonos abszorpció következtében szabad töltéshordozók keletkezhetnek a kristályon belül, ami megnöveli annak a terahertzes abszorpcióját, tehát az itt bemutatott eredmények a 100 $\frac{\text{GW}}{\text{cm}^2}$ esetén már valószínűleg túlbecsülik az elérhető hatásfokot. Ez a jelenség hosszabb impulzushossz esetén számottevőbb.

Ha megfigyeljük mindkét esetet, akkor azt látjuk, hogy az intenzitás növelésével a hatásfok maximumának elérése rövidebb kristályhosszat igényel. A legalacsonyabb $20 \frac{\text{GW}}{\text{cm}^2}$ intenzitás esetén a maximumok helyei 500 femtoszekundumnál 1,4 milliméter míg 200-nál 0,94 milliméter, ami relatíve nagy különbség. Ezt összehasonlítva a $100 \frac{\text{GW}}{\text{cm}^2}$ -es pumpálással 500 femtoszekundumnál 0,73 milliméternél van a hatásfok maximuma, 200 femtoszekundum esetén pedig 0,49 milliméternél.

III.3.2. THz-es impulzusok időbeli lefutása

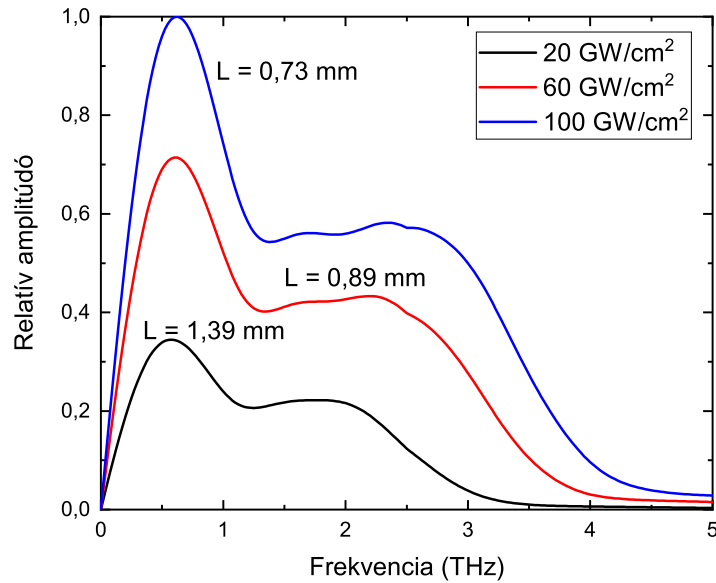
A hatásfokok önmagukban nem hordoznak elegendő információt a felhasználás tekintetében, mivel egyes alkalmazások esetén fontos lehet a THz-es impulzus időbeli alakja. Az előző számítások alapján azt tapasztaltuk, hogy az ideális THz-es alak a maximum helyének közelében található. Ebben a részben elsősorban arra keressük a választ, hogy az intenzitás nagysága hogyan befolyásolja a THz-es impulzus alakját a hatásfok maximuma közelében. Ehhez az 500- és 200 femtoszekundumos pumpa esetét külön fogjuk tárgyalni, 20-, 60-, és $100 \frac{\text{GW}}{\text{cm}^2}$ -es pumpára vonatkozó csúcshintenzitás mellett.

Elsőnek tekintsük a THz-es alakokat 500 femtoszekundumos pumpálás esetén, az előbb említett intenzitások mellett. Mindhárom esetben az adott intenzitáshoz tartozó hatásfokgörbék maximumhelyén vesszük az impulzusalakokat. Az eredményeket a 13. ábra mutatja.



13. ábra: THz-es térerősségek lefutása 500 fs-os pumpálás esetén valamennyi kezdőintenzitásnál: a) arányosan, b) normálva

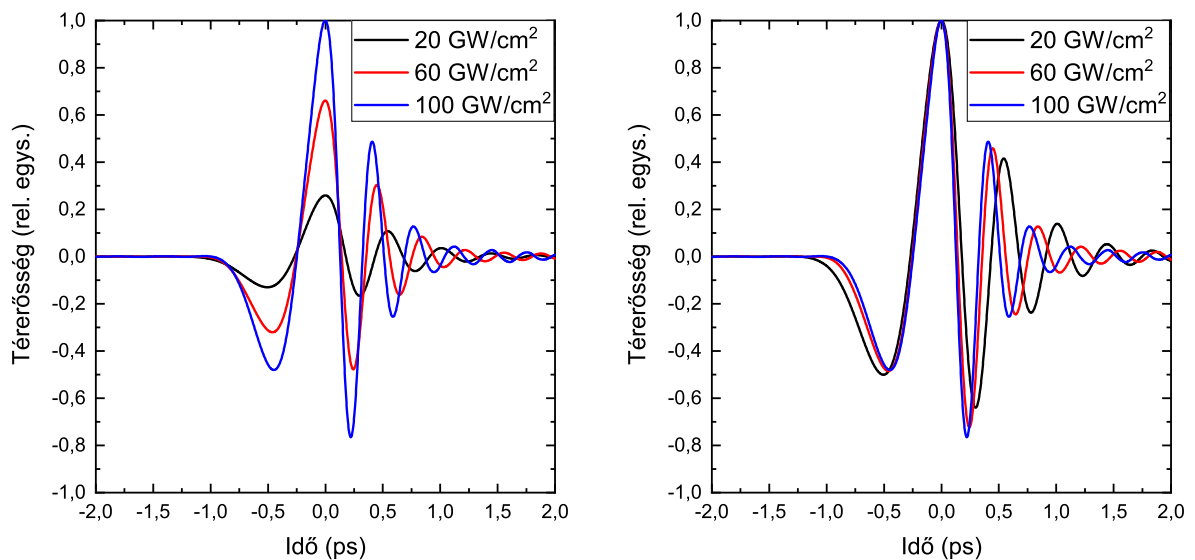
A 13.b ábrán azt láthatjuk, hogy az intenzitás növelésével nem látható nagymértékű változás a terahertzes impulzusok időbeli lefutásában. A helyi maximumok sűrűbben helyezkednek el nagyobb intenzitások esetén. Ez arra enged következtetni, hogy a spektrum maximuma a nagyobb frekvenciák felé tolódik. Vizsgáljuk tehát az időbeli alakokhoz tartozó spektrumokat amiket a 14. ábra mutat be.



14. ábra: THz-es spektrumok 500 fs-os pumpálás esetén valamennyi kezdőintenzitásnál

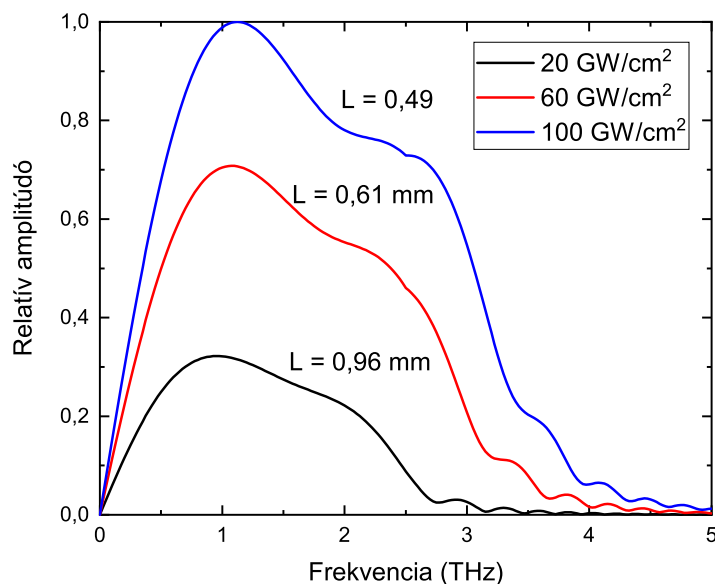
A spektrumok – csakúgy mint az időbeli lefutások – hasonlítanak egymásra. Azt tapasztaljuk, hogy a spektrumok maximuma magasabb frekvenciák felé tolódik, nagyobb intenzitásoknál. Azon számítások eredményeinél ahol az intenzitás állandó volt azt tapasztaltuk, hogy a spektrum maximuma nagyobb kristályhosszak esetén eltolódik az alacsonyabb frekvenciák felé. A pumpáló intenzitás növelésével lecsökken az ideális kristályhossz, ami magyarázza miért tolódik a spektrum maximuma a magasabb frekvenciák felé nagyobb pumpáló intenzitás használata mellett.

Nézzük meg ugyanilyen szempontok mellett, hogy miként alakul a THz-es térerősség lefutása, valamint a spektruma amennyiben 200 femtoszekundumos pumpaimpulzust feltételezünk. A THz-es impulzus időbeli lefutását a következő a 15. ábra mutatja be:



15. ábra: THz-es térerősségek lefutása 500 fs-os pumpálás esetén valamennyi kezdőintenzitásnál: a) arányosan, b) normálva

Az 500 femtoszekundumos esethez hasonlóan itt is azt tapasztaljuk, hogy az intenzitás növelésével az optikai ciklusok sűrűbben követik egymást a rövidebb kristályhosszak ellenére. A korábbi tapasztalatok azt mutatták, hogy a 200 femtoszekundumos pumpa esetén több optikai ciklus keletkezik mint 500 femtoszekundumos esetben. Ez nem változik a pumpaintenzitások megváltoztatásával. Vizsgáljuk meg az impulzus spektrumát amit a 16. ábra mutat be.



16. ábra: THz-es spektrumok 200 fs-os pumpálás esetén valamennyi kezdőintenzitásnál

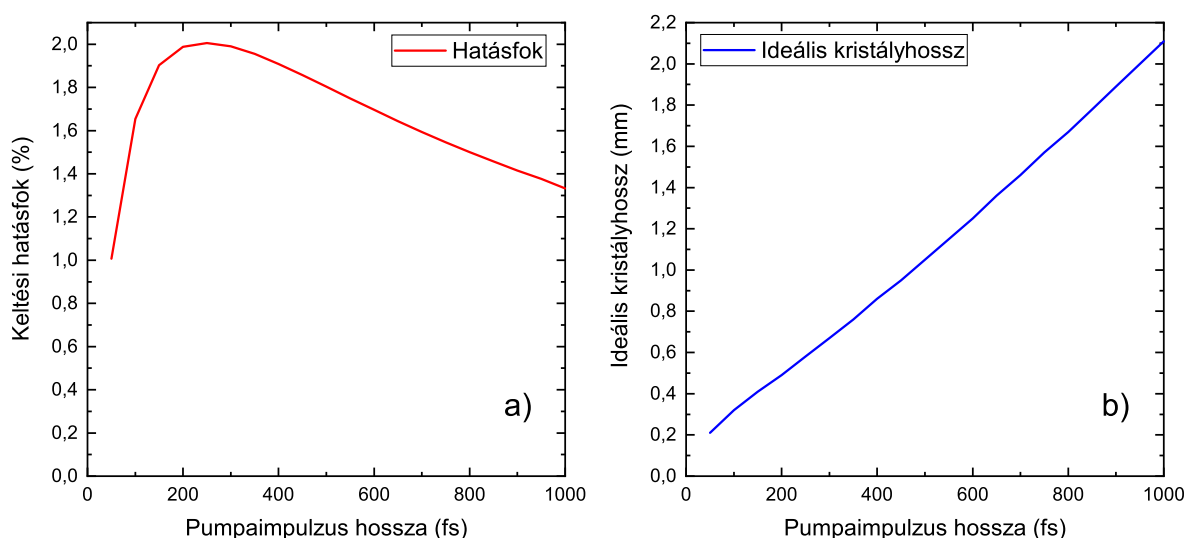
Az 500 femtoszekundumos esettel összehasonlítva azt tapasztaljuk hogy magasabb kezdő pumpaintenzitás esetén a spektrum maximuma a nagyobb frekvenciák felé tolódik ugyanazon okból.

III.3.3. Eredmények összefoglalása

A számítások eredményei azt mutatják, hogy a pumpa kezdőintenzitásának növelésével nagyobb hatásfokok érhetők el, mint alacsony intenzitások esetén. Azonban a pumpa intenzitásának van egy gyakorlati felső határa, ugyanis nagyobb intenzitások esetén a többfotonos abszorpció jelentős mértékű, ami a kristályban szabad töltéshordozókat kelt, amelyek megnövelik az LN kristály terahertzre vonatkozó abszorpcióját [16]. Az intenzitásnak még gátat szab a LN roncsolási küszöbe, mely szerint a nagy intenzitás visszafordíthatatlanul károsíthatja a kristályt [17]. Ha az időbeli és a spektrális alakokat vizsgáljuk, akkor látható, hogy az intenzitás növelésével az alakok hasonlóak, azonban az ideális terahertzes alak más kristályhossz esetén áll elő.

III.4. A pumpaimpulzus időbeli hosszának hatása

A III.1 fejezetben azt tapasztaltuk, hogy az pumpaimpulzus időbeli hosszának változtatása megváltoztatja az elérhető maximális hatásfokot, valamint azt a kristályhosszat, ahol ez a hatásfok maximális. Ezen számítások alatt a pumpa fluxusát mindvégig $20 \frac{\text{mJ}}{\text{cm}^2}$ -nek vettük. Ugyanezen fejezetben említettem, hogy a gyakorlat szempontjából előnyt élveznek az olyan elrendezések amelyek nagyobb kristályhosszat használnak, ezért most vizsgáljuk meg azt, hogyan függ az elérhető maximális hatásfok valamint a kristályhossz a maximum helyén. A számítások során a fluxust állandónak választottuk, szintén $20 \frac{\text{mJ}}{\text{cm}^2}$ -nek. Az eredményeket a 17. ábra mutatja be.



17. ábra: a) elérhető hatásfok, b) ideális kristályhossz a pumpaimpulzus időbeli hosszának függvényében

Először tekintsük az elérhető hatásfok alakulását. Azt tapasztaljuk, hogy rövid impulzus-hosszaknál ($\tau < 200$ fs) a hatásfok gyorsan növekszik az impulzus időbeli hosszának növe-
lésével. A hatásfok 250 femtoszekundumos pumpaimpulzus esetén maximális, értéke ekkor 2%. Ez után a maximális hatásfok lassan csökkenni kezd, és 1 pikoszekundumos pumpaim-
pulzusig végezve a számításokat nem tapasztaljuk a hatásfok ugrásszerű csökkenését.

Most vizsgáljuk meg azt, hogy adott időbeli hosszúságú pumpaimpulzus esetén mekkora az ideális kristályhossz. Ideális kristályhossz alatt azt a keltési hosszát értjük, ahol a hatásfok felveszi a maximumát. Ezt azért választottuk meg így, mert a dolgozatban eddig bemutatott számítások a terahertzes impulzus időbeli alakjára vonatkozóan azt mutatták, hogy az im-
pulzus alakja csak kissé vagy egyáltalán nem torzult a keltési hatásfok kristályhossz szerinti maximumában. A 17.b ábrán láthatóak ezek az ideális kristályhosszak a pumpaimpulzus időbeli hosszúságának függvényében. Nem meglepő az, hogy az időben hosszabb impulzus-
hossz esetén az ideális kristályhossz szintén hosszabb, ugyanis a pumpa fluxusát állandónak vettük, ezért a hosszabb impulzusnak kisebb a csúcsintenzitása, és ezért a visszahatás is kisebb mértékű.

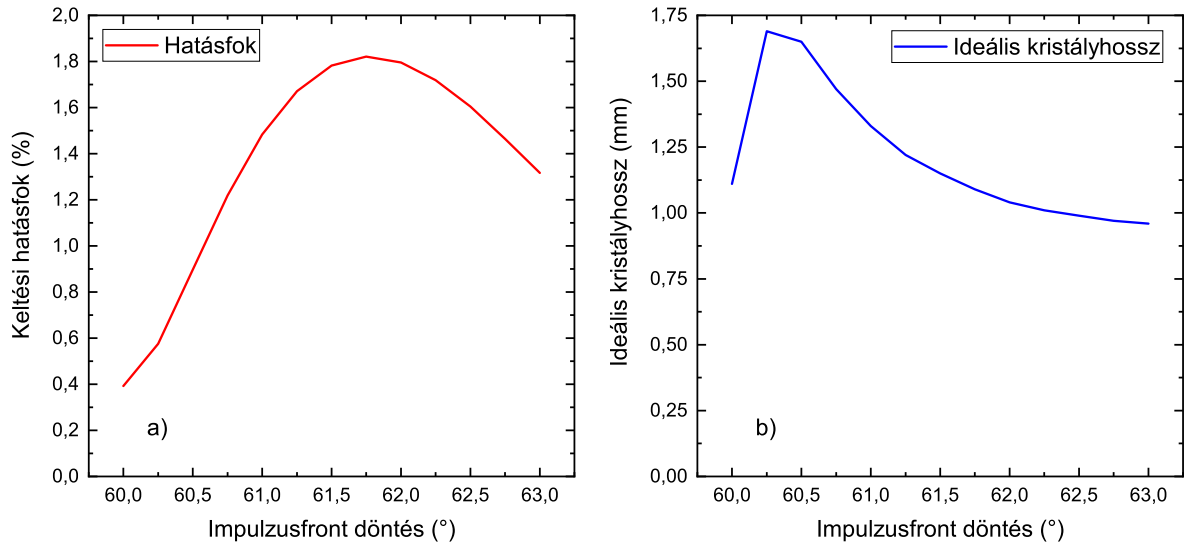
III.5. Az impulzusfrontdöntés hatása

Eddig megvizsgáltuk a pumpaimpulzus csúcsintenzitásának valamint időbeli hosszának hatását a keletkező terahertzes impulzusok időbeli alakjára valamint spektrumára vonatkozóan. A sebességillesztés frekvenciáját azonban eddig mindenhol 0,5 THz-nek vettük. A sebességillesztés teljesüléséhez szükséges impulzusfront döntést egy adott terahertzes frekvenciára az (5) egyenlet átrendezésével határozhatjuk meg a következőképp:

$$\gamma = \arccos \left(\frac{n_{p,cs}(\lambda_0)}{n_{THz,f}(\nu_0)} \right) \quad (35)$$

ahol λ_0 a pumpaimpulzus központi hullámhossza, ν_0 pedig a terahertzes illesztési frekvencia. Az eddigi számítások során az illesztési frekvencia 0,5 THz volt ami 1030 nm-es pumpaimpulzus esetén 61,96°-os impulzusfrontdöntést jelent.

Az eddig kiszámolt spektrumok maximuma minden esetben 0,5 THz és 1 THz közé esett, ezért megvizsgáltam, mi történik akkor, ha eltérünk ettől a döntési szögtől. A számításokat 500 femtoszekundumos pumpáló impulzushosszakra és $40 \frac{\text{GW}}{\text{cm}^2}$ kezdőintenzitásra végeztük. Az impulzusfront döntés szögét 60° és 63° között változtattam. Az eredményeket a 18. ábra mutatja be.



18. ábra: Impulzusfrontdöntés optimalizálása
a) maximális hatásfok, b) ideális kristályhossz

A 18.a grafikon az elérhető legnagyobb hatásfokot ábrázolja adott impulzusfrontdöntés esetén, a 18.b grafikon pedig az ideális kristályhosszat. Először vizsgáljuk meg a hatásfok görbéjét. A hatásfok maximumát 61,75°-os impulzusfront döntésnél veszi fel, ami 1,82%. A grafikonon látszik, hogy az elrendezés nagyon érzékeny az impulzusfrontdöntés változására. Ha a döntés 1°-kal kisebb akkor a hatásfok 1,21%-ra esik vissza ami 34%-os csökkenést jelent, ha pedig 1°-al nagyobb, akkor pedig 1,46%-ra, ami 20%-os csökkenést. Ez azt jelenti, hogy az impulzusfrontdöntés pontos beállítása nagyon fontos a hatékony terahertz keltés

szempontjából.

Most pedig vizsgáljuk meg a különböző döntési szögekhez tartozó ideális kristályhosszakat. A legjobb hatásfokú $61,75^\circ$ -os impulzusfrontdöntés esetén az ideális kristályhossz 1,09 milliméter. 1° -kal kisebb döntés esetén ez az érték 1,47 milliméter, 1° -kal nagyobb döntés esetén pedig 0,97 milliméter. A grafikonról leolvasható, hogy $60,5^\circ$ -nál nagyobb döntés esetén az ideális kristályhossz értéke monoton csökken. Ez feltételezhetően azért van így, mert a nagyobb mértékű impulzusfrontdöntés, nagyobb GDD-hez vezet aminek következtében a pumpaimpulzus gyorsabban torzul az előrehaladás következtében.

IV. Következtetések

IV.1. Visszahatás nélküli és visszahatásos modell

A dolgozatban bemutatott számítási eredmények jól mutatják, hogy a terahertzes visszahatásnak drasztikus hatása van a keltés hatásfokára, valamint a terahertzes impulzusra. A visszahatás nélküli modell 6-10%-os keltési hatásfokot jósol hosszú, több milliméteres kristályhosszak mellett, amíg a visszahatásos modell minden esetben 2% alatti keltési hatásfokot; mindezt 0,5- és 1 milliméter közötti kristályhosszak esetén, ami közelebb áll a kísérleti tapasztalatokhoz. Továbbá a számolások azt mutatják, hogy a visszahatásos modellel a hatásfok maximuma utáni kristályhosszak esetén az időbeli alak nagyon gyorsan torzul, használhatatlanná válik, míg a visszahatás nélküli modellel ugyanezen kristályhosszak esetén a terahertz szépen keltődik. A terahertzes visszahatás figyelembe vétele tehát nagyon fontos, a visszahatás nélküli numerikus modell nagyon pontatlanná válik nagy kristályhosszak esetén.

IV.2. Az eredmények gyakorlati jelentősége

A dolgozatban bemutatott számolások eredményei tanulságosak azoknak, akik nagy energiájú terahertzes forrásokat terveznek. A III.1 és a III.2 alfejezetekben bemutatott számolásokon keresztül látható az, hogy fontos a helyes modell megválasztása, ugyanis a terahertzes visszahatástól való eltekintés nagy pontatlanságot eredményez.

A III.3 alfejezetben bemutattam, hogyan alakul a terahertz generálás hatásfoka, valamint a terahertzes impulzusok időbeli lefutása különböző intenzitású pumpaimpulzusok esetén. Az eredmények azt mutatják, hogy a nagyobb intenzitású pumpálás nagyobb elérhető hatásfokot eredményez, viszont az ideális kristályhossz lecsökken. Itt kompromisszumot kell kötni. A nagyobb hatásfok egyértelműen előnyös, viszont a vékony kristályok gyártása, valamint felhasználása egy valós elrendezés esetén nehézkes.

A III.4 alfejezetben bemutattam miként változik a hatásfok és az ideális kristályhossz a pumpálás időbeli hosszának függvényében állandó fluxus esetén. Az impulzushossz növelésével a hatásfok csökken, viszont az ideális kristályhossz megnő. Itt szintén kompromisszu-

mot kell kötnünk. Az intenzitás és az időbeli hossz paraméterek meghatározzák, hogy milyen lézerforrást kell beszerezni.

Végül a III.5 alfejezetben bemutatam, hogy a pumpa impulzusfrontdöntésének szöge hogyan befolyásolja az elrendezés hatásfokát, illetve az ideális kristályhosszat. Ebben az esetben a számolások eredményei azt mutatják, hogy a maximális hatásfokot eredményező döntést érdemes használni, mert az ettől való már kis mértékű eltérés is komoly csökkenést okoz a hatásfokban, viszont az ideális kristályhossz nem növekszik számottevően.

IV.3. A modell egyéb felhasználási lehetőségei

A numerikus modell kódja olyan szellemiség mellett készült, hogy egyes részei is külön működő egységek legyenek (például az RK4 megoldó, törésmutató függvények stb.), illetve ezeket cserélni lehessen. Továbbá ezeket a kódokat más számításokra is fel lehet használni, valamint a modellt könnyen bővíteni lehet, amire igény is van. A pécsi terahertzes kutatócsoport munkáját segítené az, ha a modell figyelembe venné a LN többfotonos abszorpcióját, ami a gyakorlatban használt pumpáló intenzitásoknál már nem hanyagolható el. A kutatócsoport a dolgozatban bemutatott numerikus modell kódját felhasználta úgynevezett periodikusan polarizált lítium niobát (ppLN) elrendezések modellezésére.

IV.4. A modell továbbfejlesztése

A jövőben szeretnénk a modellt kiterjeszteni $2D+1$ számítások elvégzésére. Erre a legfőbb motivációnk az, hogy bár a dolgozatban bemutatott visszahatásos modell már jobb közelítést ad mint a visszahatás nélküli, de abból eredően, hogy csak 1 térdimenzióban végezzük a számításokat, a számítások eredendően pontatlanok a $2D+1$ számításokhoz képest [18]. A $2D+1$ modellel szeretnénk más elrendezéseket is modellezni, elsősorban a leképezés nélküli echelon elrendezést [19]. Ezen számítások alapját K. Ravi [20] cikke képzi. Eddigi munkánk során sikerült döntött impulzusfrontú Gauss impulzus terjedését lemodellezni, aminek helyességét analitikus számításokon keresztül hitelesítettük.

Irodalomjegyzék

- [1] X. C. Zhang, A. Shkurinov és Y. Zhang, „Extreme terahertz science”, *Nature Photonics*, 11. évf., 1. sz., 16–18. old., 2017.
- [2] P. Salén és tsai., „Matter manipulation with extreme terahertz light: Progress in the enabling THz technology”, *Physics reports*, 836. évf., 1–74. old., 2019.
- [3] Z. Ma, P. Li, S. Chen és X. Wu, „Optical generation of strong-field terahertz radiation and its application in nonlinear terahertz metasurfaces”, *Nanophotonics*, 2022.

- [4] E. A. Nanni és tsai., „Terahertz-driven linear electron acceleration”, *Nature communications*, 6. évf., 1. sz., 1–8. old., 2015.
- [5] P. Tan, J. Huang, K. Liu, Y. Xiong és M. Fan, „Terahertz radiation sources based on free electron lasers and their applications”, *Science China Information Sciences*, 55. évf., 1. sz., 1–15. old., 2012.
- [6] X. Wu, B. Zhang, J. Ma és Y. Li, „1.4 mJ High Energy THz Radiation from Lithium Niobates”, *2020 45th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz)*, IEEE, 2020, 1–2. old.
- [7] M. Bass, P. Franken, J. Ward és G. Weinreich, „Optical rectification”, *Physical Review Letters*, 9. évf., 11. sz., 446. old., 1962.
- [8] J. Hebling, G. Almasi, I. Z. Kozma és J. Kuhl, „Velocity matching by pulse front tilting for large-area THz-pulse generation”, *Optics Express*, 10. évf., 21. sz., 1161–1166. old., 2002.
- [9] F. Blanchard és tsai., „Generation of 1.5 μ J single-cycle terahertz pulses by optical rectification from a large aperture ZnTe crystal”, *Optics Express*, 15. évf., 20. sz., 13212–13220. old., 2007.
- [10] J. Hebling, K.-L. Yeh, M. C. Hoffmann, B. Bartal és K. A. Nelson, „Generation of high-power terahertz pulses by tilted-pulse-front excitation and their application possibilities”, *JOSA B*, 25. évf., 7. sz., B6–B19., 2008.
- [11] B. K. Ofori-Okai, P. Sivarajah, W. R. Huang és K. A. Nelson, „THz generation using a reflective stair-step echelon”, *Optics express*, 24. évf., 5. sz., 5057–5068. old., 2016.
- [12] J. Hebling, „Derivation of the pulse front tilt caused by angular dispersion”, *Optical and Quantum Electronics*, 28. évf., 12. sz., 1759–1763. old., 1996.
- [13] K. Osvay, A. P. Kovács, Z. Heiner, G. Kurdi, J. Klebniczki és M. Csatári, „Angular dispersion and temporal change of femtosecond pulses from misaligned pulse compressors”, *IEEE Journal of selected topics in quantum electronics*, 10. évf., 1. sz., 213–220. old., 2004.
- [14] K. L. Vodopyanov, „Optical generation of narrow-band terahertz packets in periodically-inverted electro-optic crystals: conversion efficiency and optimal laser pulse format”, *Optics Express*, 14. évf., 6. sz., 2263–2276. old., 2006.
- [15] K. Ravi, W. R. Huang, S. Carbajo, X. Wu és F. Kärtner, „Limitations to THz generation by optical rectification using tilted pulse fronts”, *Optics express*, 22. évf., 17. sz., 20239–20251. old., 2014.
- [16] M. Cherchi és tsai., „Second-harmonic generation in surface periodically poled lithium niobate waveguides: on the role of multiphoton absorption”, *Applied Physics B*, 93. évf., 2. sz., 559–565. old., 2008.
- [17] H. Badorreck, S. Nolte, F. Freytag, P. Bäune, V. Dieckmann és M. Imlau, „Scanning nonlinear absorption in lithium niobate over the time regime of small polaron formation”, *Optical Materials Express*, 5. évf., 12. sz., 2729–2741. old., 2015.
- [18] L. Wang, T. Kroh, N. H. Matlis és F. Kärtner, „Full 3D+ 1 modeling of tilted-pulse-front setups for single-cycle terahertz generation”, *JOSA B*, 37. évf., 4. sz., 1000–1007. old., 2020.

- [19] G. Tóth és tsai., „Numerical investigation of imaging-free terahertz generation setup using segmented tilted-pulse-front excitation”, *Optics express*, 27. évf., 5. sz., 7762–7775. old., 2019.
- [20] K. Ravi és tsai., „Theory of terahertz generation by optical rectification using tilted-pulse-fronts”, *Optics express*, 23. évf., 4. sz., 5253–5276. old., 2015.

Köszönetnyilvánítás

A szakdolgozat az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-1-I-PTE-1045 kód-számú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

NYILATKOZAT

az írásmű eredetiségéről

(PTE SZMSZ 5. sz. mellékletének 14/1. számú melléklete lapján)

Alulírott Illés Gergő (HHU75J), büntetőjogi felelősségem tudatában kijelentem, hogy „Terahertzes impulzusok terjedésének és keltésének modellezése” című írásomban foglaltak saját, önálló munkám eredményei, ennek elkészítéséhez kizárólag a hivatkozott forrásokat (szakirodalom, eszközök stb.) használtam fel, írásomat a Pécsi Tudományegyetem vonatkozó szabályzatainak betartásával készítettem. Tudomásul veszem, hogy a szerzői jogi szabályok betartását a Pécsi Tudományegyetem plágiumkereső rendszeren keresztül ellenőrizheti.

Pécs, 2022. április 30.

.....
hallgató aláírása