

Гауссын пульсээр устөрөгчийн атомыг үйлчлэх

Ишдорж Адъяадолжин¹, Зоригт Гомбосүрэн¹, Алдармаа Чулуунбаатар^{1*},
Хэнмэдэх Лочин¹

¹ *Физикийн тэнхим, Хэрэглээний шинжлэх ухааны сургууль, ШУТИС,
Улаанбаатар 14191, Монгол*
Холбоо баригч зохиогч. Email: aldarmaa@must.edu.mn, ORCID: 0000-0003-1011-4354

Хураангуй

Энэхүү судалгаагаар шугаман туйлшралтай Гауссын лазерын богино импульс болон устөрөгчийн атомын харилцан үйлчлэлийг судалж, долгионы функцийг хугацаанаас хамааруулан тодорхойлж, шинжилгээ хийлээ. Үр дүнгээс харахад лазерын пульсийн үргэлжлэх хугацаанаас хамаарч фотоэлектроны долгионы функцэд хуйлрал үүсэж байна. Тухайлбал, лазерын пульсийн урт ихсэх тусам фотоэлектроны энергийн өндөр мужид хуйлралууд олноор үүсэж байгааг харууллаа.

Түлхүүр үг: *Уртын тохируулга, фотоэлектроны моментын түгэлт, хуйлрал*

1. ОРШИЛ

Лазер-атомын харилцан үйлчлэлийн үед шугаман бус процессын олон төрлийн үзэгдлүүд ажиглагддаг. Лазер болон атомын харилцан үйлчлэлийн туршилтаар тодорхойлогддог гол үр дүнгүүдийн нэг нь фотоэлектроны импульсийн түгэлт (PMD) юм [1]. Атомаас сугаран гарах электроны долгионы функц нь лазерын пульсийн үйлчлэлээр өөр өөр хугацаанд үүссэн долгионы багцуудын интерференцийн үр дүн юм [2]. Иймээс фотоэлектроны импульсийн түгэлт (PMD) нь интерференцийн нарийн төвөгтэй бүтцийг өөртөө агуулдаг [3].

Устөрөгчийн атом ба янз бүрийн хэлбэр бүхий лазерын импульсийн харилцан үйлчлэлээс үүсэх фотоэлектроны импульсийн спектрийг долгионы функцийн локал утгаар шууд тодорхойлж болохыг бид өмнө нь тогтоосон. Бидний гарган авсан дээрх үр дүнгүүд нь шилжилтийн амплитудад суурилсан уламжлалт тооцооллын үр дүнтэй өндөр түвшинд нийцэж байна [4].

Мөн энэхүү долгион функцийн локал утгаар шууд тооцоолох аргаар цэнэгт бөөм-атомын мөргөлдөөний хувьд бүрэн дифференциал огтлолыг тооцоолсон [5]. Бид Кулоны долгионы функцийн дискрет хувьсагчийн аргыг ашиглан (CWDVR) [6-9] лазер болон атомын харилцан үйлчлэлийн хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг тоон аргаар бодож, фотоэлектроны импульсийн түгэлтийг тодорхойлсон. Фотоэлектроны импульсийн түгэлт нь электроны магадлалын нягтын түгэлттэй ижил төстэй шинж чанартай болохыг өмнөх судалгааны үр дүнгүүд баталсан юм. Энэхүү судалгааны ажилд туршилтын лазерын пульстэй ойрхон буюу Гауссын лазерын пульсийг сонгон авч, 0.455 а.н төвийн давтамжтай шугаман туйлширсан лазерын богино пульсээр устөрөгчийн атомыг үйлчлэн долгион функцийн хувьсалыг судаллаа. $5 \cdot 10^{12}$ Вт/см² эрчимтэй лазерын пульсийн хувьд пульсийн уртыг 4 а.нэгжээс 80 а.н хүртэл байхаар өөрчлөн долгион функцэд үүсэх

хуйлралыг харууллаа. Энэхүү ажилд атомын нэгжийн системийг ашигласан болно.

2. ОНОЛ

Лазерын пульс ашиглан устөрөгчийн атомыг үндсэн төлөвөөс нь ионжуулж, электроны долгион функцийг хувьслыг тодорхойлохдоо хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг тоон аргаар тооцоолно.

$$i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

Кулоны долгион функцийг дискрет хувьсагчийн аргаар тооцоолохдоо лазер-атомын харилцан үйлчлэлийг уртын тохируулгатайгаар авав.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} - \frac{1}{r} + \mathbf{r} \cdot \mathbf{E}(t) \quad (2)$$

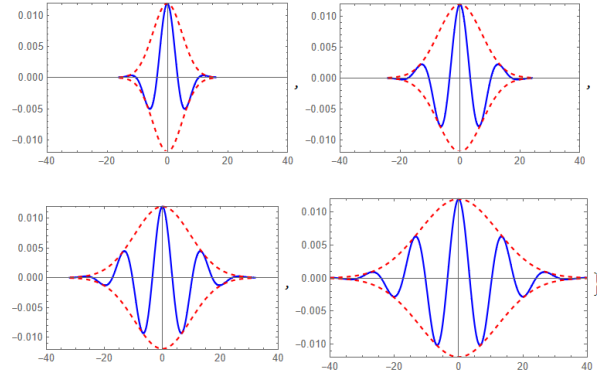
Долгион функц нь z тэнхлэгийн хувьд эргэлтийн тэгш хэмтэй тул туйлын координатын системд тооцоололыг хийв. Гаусс лазерын пульсийн цахилгаан орныг z тэнхлэгийн дагуу шугаман туйлшралтайгаар дараах хэлбэрээр авлаа.

$$E(t, \sigma, t_0) = E_0 \text{Exp} \left[\frac{2 \text{Log}(2)(t + t_0)}{\sigma^2} \right] \text{Cos} [\omega(t + t_0)] \quad (3)$$

Энд E_0 – лазерын цахилгаан орны далайц, $\sigma = \tau/2$, 2τ – пульсийн урт, ω – төвийн давтамж, $t_0 = -\tau$ [10]

Зураг 1 –т лазерын пульсийг уртыг 4 а.нэгжээс 80 а.н хүртэл өөрчлөн авч тухай бүрт нь судлав. Энд лазерын импульсийн төв цэгийг хугацааны тэг утга байхаар тохируулан тооцоололыг хийв. Электроны долгион функцийг модуль $a = |\Psi(\mathbf{r}, t)|$ болон $S = \text{Arg}(\Psi(\mathbf{r}, t))$ фазаар дараах байдлаар илэрхийлж болно:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = a \cdot e^{i S(\mathbf{r}, t)} \quad (4)$$



Зураг 1. Лазерын пульс ($I=5 \cdot 10^{12}$ Вт/см², төвийн давтамж $\omega = 0.455$ а.н). Пульсийн урт $2\tau= 32, 48, 64, 80$ а.н тохиолдлуудыг дүрслэв.

Үүнийг Шредингерийн тэгшитгэлд оруулж, бодит ба хуурмаг хэсгүүдийг ялган урсгал тасралтгүйн тэгшитгэл болон Гамильтон-Якобийн тэгшитгэлийг гаргаж авна [11]. Гамильтон-Якобийн тэгшитгэл нь

$$-\frac{\partial}{\partial t} S(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} (\nabla S(\mathbf{r}, t))^2 + V_{eff}(\mathbf{r}) - \frac{1}{2a} \Delta a \quad (5)$$

Гамильтон-Якобийн тэгшитгэлийн баруун тал нь кинетик энерги, Кулоны потенциал энерги, Бомын потенциал энергиэс бүрдэнэ. Тиймээс тэгшитгэлийн зүүн тал буюу фазын тухайн уламжлал нь тухайн координатад харгалзах нийт энергийг тодорхойлно

$$\varepsilon(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial S(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (6)$$

Долгион функцийг фазыг хугацаанаас хамааруулан тодорхойлсноор (6) томъёог ашиглан тодорхой хугацааны эгшин бүрт координатын цэг бүр дээр (хугацааны уламжлалыг төгсгөлөг ялгаварын аргаар тооцоолж) бүрэн энергийг тодорхойлж чадна. Энэ нь фотоэлектроны бүрэн энергитэй тохирох бөгөөд хязгааргүйд электроны кинетик энергид хувирна. Ингэж хугацааны хязгааргүйд харгалзах фотоэлектроны кинетик энергийг координатын цэг бүрт тодорхойлдог. Тиймээс бид тухайн байршил дахь фотоэлектроны магадлалын нягтыг долгионы функцийг модулийн квадратаар тодорхойлох замаар импульсийн түгэлтийн

нягтыг тодорхойлно. Борны тайлбараар долгионы функцийн модулийн квадрат нь бөөмийг олох магадлалын нягт юм.

$$\frac{dP}{dv} = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (7)$$

Эндээс, эзлэхүүний дифференциалыг туйлын координатын системд бичвэл,

$$\frac{dP}{d\theta dr} = r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (8)$$

Суларсан электроны энерги-радиусын хамаарлаас ажиглахад электрон цөмийн харилцан үйлчлэлийн бүсээс гарч, радиал чиглэлд бараг саадгүй хөдөлдөг. (6) илэрхийлэлээс энерги координатын хамаарал тодорхойлогдох тул (8) тэгшитгэл дэх радиал дифференциал нь энергитэй дараах байдлаар холбогдоно.

$d\varepsilon = \frac{\partial \varepsilon}{\partial r} dr$ Үүнийг ашиглан бид дараах илэрхийллийг гарган авч болно.

$$\frac{dP}{d\theta d\varepsilon} = r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial r}\right)^{-1} \quad (9)$$

нийт энерги хадгалагдах хуулийг авч үзвэл, тухайн үед тодорхойлогдсон энерги нь ε тухайн цэгт харгалзах хязгааргүй холд кинетик энергийг тодорхойлно. $\varepsilon = \frac{k^2}{2}$ энд $t \rightarrow \infty$. Иймд, $d\varepsilon = kdk$ учир

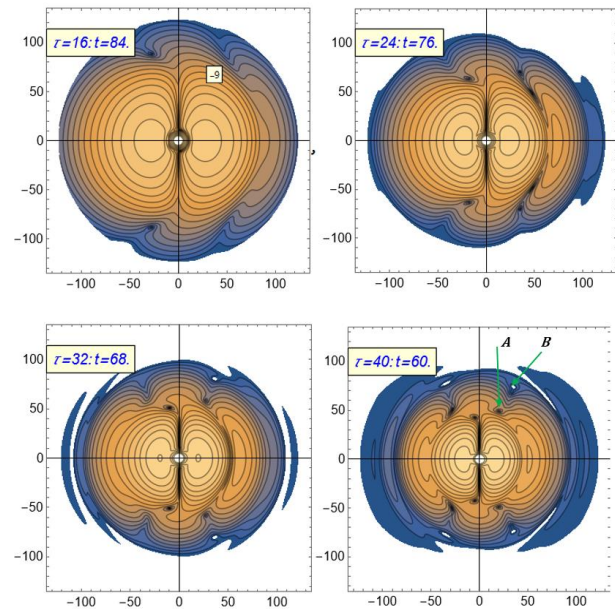
$$\frac{dP}{d\theta dk} = k r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial r}\right)^{-1} \quad (10)$$

Энд энерги радиусын хамаарал парабол төстэй тул [4] энергийн уламжлал нь бараг тогтмол болж фотоэлектроны түгэлт нь $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ буюу электроны магадлалын нягтын түгэлттэй төстэй болно.

Үр дүн

Кулоны дискрет хувьсагчийн аргад Кулоны континиумын долгион функцийг цэнэг тоог 120, долгионы тоог 4 байхаар авч радиал зангилааг түүний язгуураар авч тооцооллыг хийв. Хугацааг t_0 эгшинээс эхлүүлэн 0.1 алхамтайгаар 3000 итерац хийж тооцоолсноос зарим жишээг зураг 2-д үзүүлэв. Бодолтыг радиал 800 зангилаатай

авахад хамгийн их радиус нь 583 байв. Зураг 2-т долгион функцийг үзүүлэв. Зураг 2-т лазерын пульсийн урт ихсэхэд электроны магадлалын нягтад хуйлралын төвүүд олширч байгааг түүний минимумын тоогоор илэрч байгаагаас харж болно.

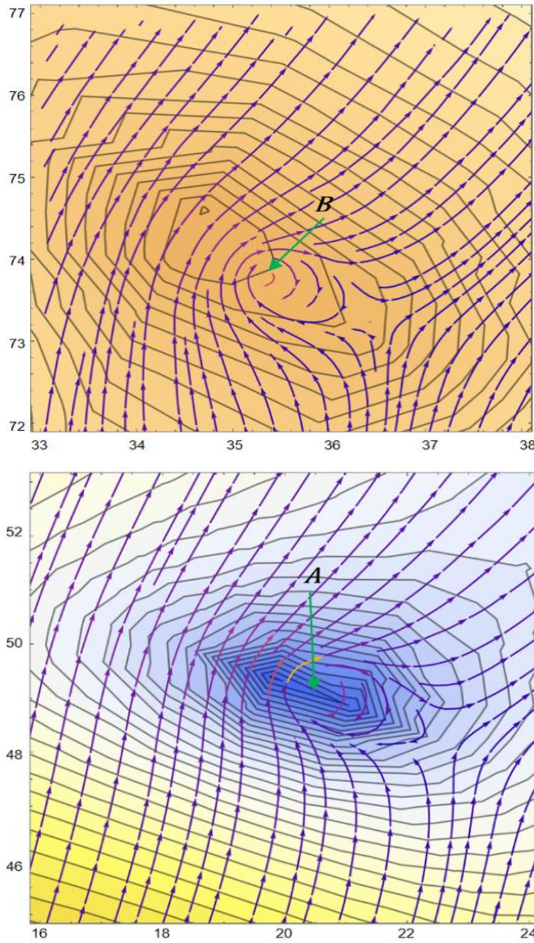


Зураг 2. Долгион функцийн $\log_{10}|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ -н утга буюу электроны магадлалын нягтыг огторгуйг дахь тархалтыг дүрслэн үзүүлэв. Энд лазерын пульсийн урт 32а.н, 48а.н, 64а.н, 80а.н тохиолдлуудад харгалзан 84,76,68,60 эгшинд босоо тэнхлэгийн дагуу u , хэвтээ тэнхлэгийн дагуу z байхаар дүрслэв.

Долгионы функцийн минимумууд цэг эсвэл судал хэлбэрээр үүсч байгаа мужуудад контурын шугамууд нягтарч харалсан байгаагаас харж болно. Энэ нь долгионы функцэд үүсэх хуйлралын төвүүдийг илэрхийлнэ [12.] Пульсийн урт 80а.н үед 1000 алхмын дараах долгион функцийг зураг 2 –ийн сүүлийн зурагт дүрслэсэн ба А,В цэгүүдийн орчимд үүсэх хуйлралыг шинжлэх болно. Бид долгионы функцийг градиентийг тооцоолж импульс буюу хурдыг тодорхойлно. Зураг 3-т А(20.5,49.2), В(35.3,73.8) координаттай цэгүүдэд төвтэй хуйлралыг урсгалын шугамаар дүрслэн харуулав. Энд долгион функцийг модулын квадратыг эдгээр цэгүүдийн орчим контураар дүрслэн урсгалын шугамуудыг давхцуулан дүрслэв. Дээр дурдсан байрлалууд нь долгионы функцийг модулийн квадратын хамгийн

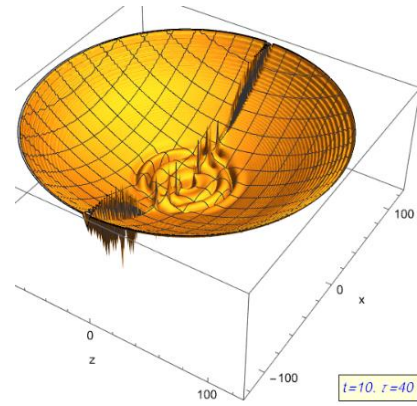
бага утгуудын байршлуудтай тохирч байна. (Зураг 3).

Тооцооллын 500 дахь алхам 501-р алхамд долгионы функцүүд нь хугацааны $\Delta t=0.1$ зөрүүтэй учир Лазерын туйлширалын хавтгай дээрх энергийг тэдгээрийн фазын зөрүүгээр (6) томъёог ашиглан тооцоолж, үр дүнг гурван хэмжээст хэлбэрээр Зураг 4-д дүрслэв.



Зураг 3. Хуйлрал.

Зураг 4-д лазерын пульсийн үйлчлэлээр атомын төв орчимд энергийн гадаргууд тунарсан долгио үүсч буй нь ажиглагдаж байна. Хуйлралын төвийн ойролцоо кинетик энерги огцом ихсэж, Бомын потенциал минимум үүсгэдэг [12]. Зураг 4-д энергийн гадаргууг дүрслэв. Босоо тэнхлэгийн дагуу энергийн утга, хэвтээ тэнхлэгүүд z ба x болно.



Зураг 4. Энергийн гадаргуу ($t = 10$)

Хугацаанаас хамаарсан хувьслын үр дүнгээс харахад атомын төвийн орчимд хэд хэдэн хурц (шовх) оргил үүссэн байна. Энэ нь континуум төлөвт шилжих фотоэлектроны долгионы функцийг хуйлралын төвүүд бүрэлдэж буй үйл явц юм

ДҮГНЭЛТ

Энэхүү судалгааны ажлаар шугаман туйлшралтай Гауссын богино лазерын пульс болон устөрөгчийн атомын харилцан үйлчлэлийг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг Кулоны долгионы функцийг дискрет хувьсагчийн аргаар бодож, фотоэлектроны долгионы функцийг хувьслыг онолын хувьд шинжлэн судлав. Лазерын пульсийн үргэлжлэх хугацааг 4 а.н-өөс 80 а.н хүртэл ихэсгэхэд фотоэлектроны долгионы функцэд үүсэх интерференцийн зураглалд олон минимумууд үүсэж байна. Лазерын пульсийн үйлчлэлээр атомын төв орчимд энергийн гадаргууд тунарсан долгио үүсч, фотоэлектроны долгионы функцийг модулийн хамгийн бага утга бүхий цэгүүдэд хуйлралын төвүүд бүрэлдэж байгааг урсгалын шугамаар баталгаажуулан харууллаа. Лазерын пульс уртсах тусам фотоэлектроны энергийн их мужид үүсэх хуйлралын тоо олширч байгаа нь долгионы функцийг фазын градиентаар илэрч байна. Бид локал энергийн утгуудаар энергийн гадаргууг байгуулж хуйлралын төвүүд дээр энергийн максимум үүсдэг болохыг харууллаа.

ТАЛАРХАЛ

Энэхүү судалгааны ажлыг ШУТИС-ийн судалгааны MFund-03/2025 дугаартай төслээр санхүүжүүлсэн болно.

REFERENCES

- [1] J Maurer and U Keller, Ionization in intense laser fields beyond the electric dipole approximation: concepts, methods, achievements and future directions, 2021 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 54 094001, DOI 10.1088/1361-6455/abf731
- [2] W. Becker, F. Grasbon, R. Kopold, D. Milošević, G. Paulus, and H. Walther, "Above-threshold ionization: from classical features to quantum effects," *Advances in Atomic Molecular and Optical Physics* **48**, 35–98 (2002). <https://doi.org/10.1364/OE.448948>
- [3] J. Tan, Y. Zhou, Q. Ke, M. He, J. Liang, Y. Li, M. Li, and P. Lu, "Resolving strong-field tunneling ionization with a temporal double-slit interferometer," *Phys. Rev. A* **101**(1), 013407 (2020).
- [4] Ishdorj Adiyadoljin, Zorigt Gombosuren, Khenmedekh Lochin, Altangoo Ochirbat, Aldarmaa Chuluunbaatar, Direct Determination of the Photoelectron Momentum Distribution from the Wave Function, *Key Engineering Materials* (Volume 1029), 11-18, <https://doi.org/10.4028/p-TRhE06>
- [5] Zorigt Gombosuren, Khenmedekh Lochin, Aldarmaa Chuluunbaatar, Altangoo Ochirbat, Direct Determination of the Fully Differential Cross Section by the Time-Dependent Wave Function, *Key Engineering Materials* (Volume 1029), 19-26, <https://doi.org/10.4028/p-HQk8Nu>
- [6] J. C. Light, I. P. Hamilton, and J. V. Lill Light, Generalized discrete variable approximation in quantum mechanics, *J. Chem. Phys.* 82, 1400, 1985, <https://doi.org/10.1063/1.448462>
- [7] K.M.Dunseath, J.M Launay, Schwartz interpolation for problems involving the Coulomb potential, *Phys B: Mol. Opt. Phys* 35 (2002) 3539-3556, DOI 10.1088/0953-4075/35/16/313.
- [8] Schwartz Charles, High accuracy approximation techniques for analytic functions 1984 *J.Math.Phys* 26, 411, (<https://doi.org/10.1063/1.526624>)
- [9] Zorigt Gombosuren, Aldarmaa Chuluunbaatar, Khenmedekh Lochin, Lkhagva Oidov, Khatanbold Erdenebayar, Antiproton impact ionization of hydrogen atom: Differential cross sections computed by Coulomb wave function discrete variable representation method, *Journal of Applied Science and Engineering A*, Vol. 3 No. 1 (2022), <https://doi.org/10.5564/jasea.v3i1.2477>
- [10] A L Harris, Spectral phase effects in above threshold ionization, 2023 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 56 095601, DOI 10.1088/1361-6455/acc49e
- [11] Landau, L. D., Lifshitz, E. M. (1974) "Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory", Teoreticheskaya Fizika III, Moscow
- [12] Zorigt G, Aldarmaa Ch, Khenmedekh.L The vortex in the atomic wavefunction resulting from short electrical pulses. *Physic*, Vol. 33 No. 562 (2022), DOI: <https://doi.org/10.22353/physics.v33i562.934>

Interaction of a hydrogen atom with a Gaussian pulse

Ishdorj Adiyadoljin¹, Zorigt Gombosuren¹, Aldarmaa Chuluunbaatar^{1*},
Khenmedekh Lochin¹

¹*Department of Physics, School of Applied Sciences, Mongolian University of Science and Technology, Ulaanbaatar, Mongolia*

Corresponding author: aldarmaa@must.edu.mn, ORCID: 0000-0003-1011-4354

ABSTRACT

This study investigates the interaction between a linearly polarized short Gaussian laser pulse and a hydrogen atom by determining and analyzing the time-dependent wave function. The results demonstrate that vortices form within the photoelectron wave function depending on the laser pulse duration. Specifically, it is shown that as the pulse duration increases, a greater number of vortices emerge in the high-energy region of the photoelectron spectrum.