

Фотоэлектроны импульсын түгэлтийг долгион функцээр шууд илэрхийлэх

Л.Хэнмэдэх, Ч.Алдармаа*, Г.Зоригт

Шинжлэх Ухаан Технологийн Их Сургууль, Хэрэглээний Шинжлэх Ухааны Сургууль, Физикийн тэнхим

Фотоэлектроны иончлолын магадлалын нягтыг квант механикын уламжлалт арга болох амплитудаар болон шинэ арга болох долгион функцээр шууд тодорхойллоо. Лазерын пульсээр устөрөгчийн атомыг иончлоход дээрх хоёр аргаар иончлолын импульсын түгэлтийг тооцоолоход хэлбэр болон максимумын байрлалууд тохирч байна. Устөрөгчийн атомын хувьд иончлолын магадлалын нягтыг шууд долгион функцээр илэрхийлэх боломжтойг харуулж байна.

PACS numbers: Gs67.63.Gh, 67.80.Fh, 67.25.dt, 42.60.Rn, 31.55.ee

ОРШИЛ

Орчин үед атом болон молекулын түвшинд богино хугацаанд явагдах процессыг лазерын пульсээр судлаж байна. Үүнтэй уялдан хэт богино лазерын пульс атомтай харилцан үйлчлэх онолын судалгааны ажлууд хийгдсээр байна. Лазерын пульсээр атомыг цочрооход электроны өдөөлт болон иончлолоор сугарсан фотоэлектроны импульсын түгэлтийг тодорхойлох нь онолын судалгааны гол асуудал болно. Гэрэл атомын үйлчлэлээр иончлогдох фотоэлектроны импульсын түгэлтийг R матрицын онолоор [1,2], хөндөх онолоор [3], хүчтэй орны ойролцооллоор [4,5], хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр [6,7] тооцоолсон байна. Энэ нь цахилгаан соронзон долгион атомын харилцан үйлчлэлийг судалж байгаа хэдий ч лазерын хэт богино пульсын хувьд тооцоололын аргууд нь хангалтгүй болж ирсэн. Лазерын пульс атомын харилцан үйлчлэлийн хувьд фотоэлектроны импульсын түгэлтийг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр [8,9], харин олон электронтой атомын хувьд нэг идэвхитэй электроны ойролцооллоор (SAE) [10,11], хугацаанаас хамаарсан Нягтын функционалын онолоор [12] тус тус тооцоолсон байна. Бид Кулоны долгион функцын дискрет хувьсагчийн аргыг ашиглан лазер атомын харилцан үйлчлэлийг

хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг шууд бодох замаар өдөөлт иончлолын магадлалуудыг тодорхойлсон [13,14]. Дискрет хувьсагчийн төлөөлөлийн аргыг анх Harris нар 1965 онд [15], Dickinson, Certain нар 1968 онд [16], Lill, Light нар 1982 онд [17], Light нар 1985 онд [18] зэрэг олон судлаачид хөгжүүлж иржээ. Кулоны потенциалыг тооцоололд 2002 онд К.М. Dunseath, J.M Launay [19] нар Schwartsz [20] –ийн интерполяцын аргад үндэслэн устөрөгчийн атомын холбоост төлөвийн энерги болон радиал моментуудыг тооцоолсон нь Кулоны долгион функцын дискрет хувьсагчийн төлөөлөлийн арга (CWDVR) нь иончлолын бодлогод үр дүнтэй болохыг харуулсан. Энэ ажилд лазерын атомын харилцан үйлчлэлийг CWDVR ашиглан хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг тоон аргаар бодож, фотоэлектроны импульсын түгэлтийг Г.Зоригт нарын [21] ажилд дурьдсан аргаар долгион функцын модулын квадратаар илэрхийлэх боломжийг судаллаа. Энэхүү өгүүлэлд хэмжигдэхүүнүүдийг атом нэгжийн системээр илэрхийлсэн.

ОНОЛ

Лазер атомын харилцан үйлчлэх процессыг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр шийдэж электроны төлвийн өөрчлөлтийн динамикийг ашиглан иончлолын магадлалыг тооцооллоо. Гадны оронд байгаа

* Electronic address: aldarmaa@must.edu.mn

атомын электроны хувьд Шредингерийн тэгшитгэлийг бичвэл [22]

$$i \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}(\vec{r}, t)) \Psi(\vec{r}, t) \quad (1)$$

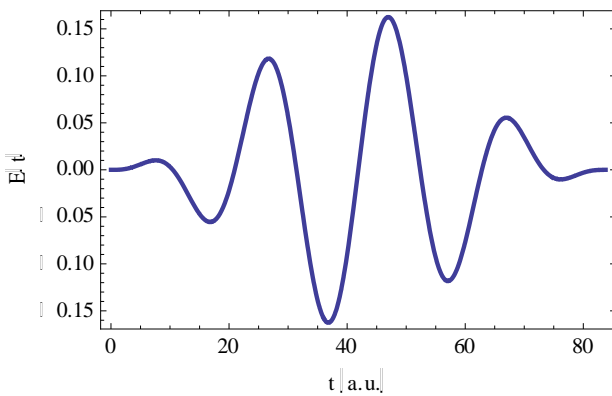
Энд: $\Psi(\vec{r}, t)$ - электроны долгион функц, \hat{H}_0 - устөрөгчийн атомын гамилтанионы оператор, $\hat{V}(\vec{r}, t)$ - гадны орны харилцан үйлчлэлийн оператор.

$$\hat{V}(\vec{r}, t) = \vec{r} \cdot \vec{E}(t) \quad (2)$$

Лазерын цахилгаан орон:

$$E(t) = E_0 \cos(\omega t + \phi_0) \sin\left(\frac{\pi t}{\tau}\right)^2 \quad (3)$$

E_0 - лазерын цахилгаан орны далайц, τ - пульсийн үргэлжлэх хугацаа, ω - давтамж,



Зураг 1. Лазерын цахилгаан орны хугацааны хамаарал.

$$(I = 10^{15} \text{ Bm} / \text{cm}^2, \omega = 0.3, \lambda = 152 \text{ nm}, N = 4)$$

Хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг тоон аргаар тооцоолон хугацаанаас хамаарсан долгион функцыг гарган авч фотозэлектроны магадлалыг нягт болон импульсын түгэлтийг тодорхойлоё.

Иончлолын магадлалын түгэлтийг континиум долгион функц дээр проекцлон тодорхойлох нь

$$\frac{dP}{d\epsilon d\Omega_k} = \lim_{t \rightarrow \infty} |\langle \Phi_k^-(\mathbf{r}) | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle|^2 \quad (4)$$

Энэхүү арга нь квант механикын уламжлалт арга бөгөөд бид устөрөгчийн атомын хувьд континиум долгион функц $\Phi_k^-(\mathbf{r})$ -г аналитик илэрхийлэлийг ашиглалаа. Хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг CWDVR тоон аргаар тооцоолон лазерын пульс атомтай харилцан үйлчлэл дууснаас хойшхи буюу τ хугацааны дараах долгион функцыг континиум долгион функцэд проекцлон

импульсын огторгуй дах фотозэлектроны импульсын түгэлтийг тооцоолон зураг 4-т үзүүлээ. Устөрөгчөөс ялгаатай атом молекулуудын хувьд континиум долгион функц нь аналитик хэлбэр нь тэр бүр тодорхой биш учир энэхүү аргаар импульсын түгэлтийг тодорхойлоход хүндрэл учирдаг. Харин цэнэгт бөөм атомын мөргөлдөөний хугацааны эволюцын судалгаа сэдэвт [21] бүтээлд дурьдснаар урьдчилан бэлтгэсэн континиумын долгион ашиглахгүйгээр, долгион функцын модулын квадратаар иончлолын дифференциал огтлолыг тодорхойлсон байна. Иймд бид энэхүү аргыг лазер атомын харилцан үйлчлэлийн үед фотозэлектроны импульсын түгэлтийг тодорхойлоход ашиглах боломжтой эсэхийг авч үзье.

Борны интерпретаци ёсоор бөөмийн магадлалын нягт нь долгион функцын модулын квадрат байна.

$$\frac{dP}{dV} = |\Psi|^2 \quad (5)$$

Энд бөмбөлөг координатын систем дэх эзлэхүүний дифференциалыг дараах байдлаар хувирагя.

$$dV = r^2 dr d\Omega = d\epsilon d\Omega \frac{r^2 dr}{d\epsilon} \quad (6)$$

Үүнийг (4) –ийн эзлэхүүний дифференциалд орлуулж иончлолын дифференциал магадлалыг тодорхойлбол

$$\frac{dP}{d\epsilon d\Omega} = \frac{dr}{v dv} |r \Psi|^2 \quad (7)$$

Ψ нь t хугацаанд тодорхойлогдсон долгион функц, v хурд нь ϵ энергитэй бөөмийн хурд, $\frac{dr}{dv}$ түүнд харгалзах координат дээр уламжлалын утгыг ашиглана.

Долгион функцыг комплекс экспоненциал хэлбэрээр бичвэл:

$$\Psi = |\Psi| e^{iS} \quad (8)$$

Энд: S –фаз, Квант механикт бөөмд харгалзах классик хурдыг долгион функцын фазаар илэрхийлбэл:

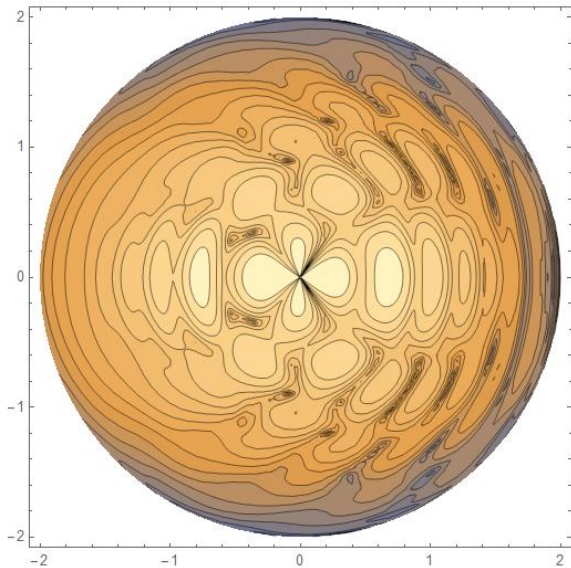
$$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} = \frac{\vec{\nabla} S}{m} \quad (9)$$

болно. Бид хугацааны тухайн эгшинд тодорхойлсон долгион функцээр координатын огторгуйн цэгүүд дээрх бөөмийн хурдыг фазын градиентаар тодорхойлох боломжтой. Бөөмийн хурд координатын хамааралаас тухайн

координат дээрх $\frac{dr}{dv}$ уламжлалын утгыг тодорхойсноор (7) илэрхийлэлээр фотоэлектроны импульсын түгэлт тодорхойлогдоно.

ТООЦООЛЛЫН ҮР ДҮН

Үндсэн төлөвтөө байгаа устөрөгчийн атомыг $I = 10^{15}$ Вт/см² эрчимтэй, 4 циклтэй, 0.3 а.н давтамжтай 2.026 фемтосекундын лазерын пульсээр үйлчлэн фотоэлектроны импульсын түгэлтийг тодорхойлоё. Үүний тулд хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг CWDVR аргаар бодож долгион функцыг тооцоолсон. Энд CWDVR- д Кулоны долгионы функцын долгион тоо 2, цэнэг тоог 20, радиал зангилааны тоог 400 байхаар сонгон авч хугацааг 320 хүртэл тооцооллоо.

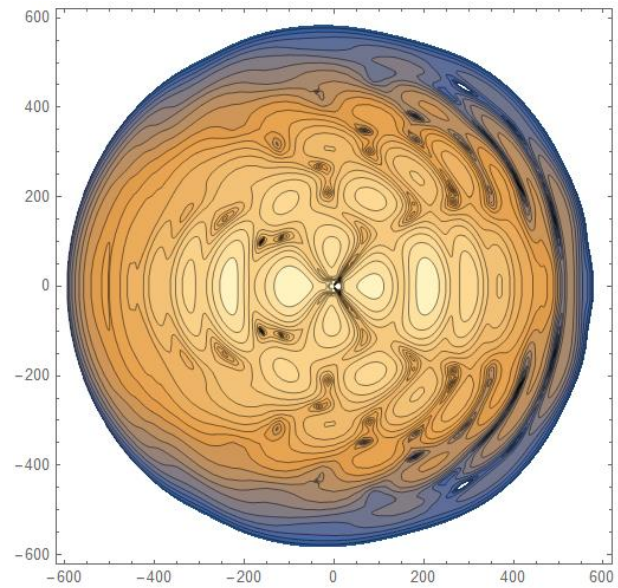


Зураг 2. Амплитудаар тодорхойлсон фотоэлектроны импульсын түгэлт.

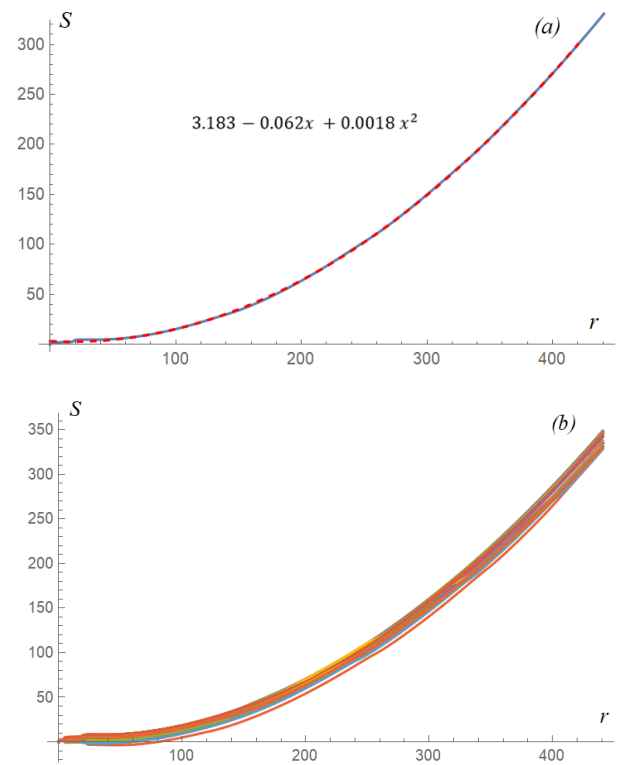
Квант механикын уламжлалт арга болох иончлолын амплитудаар (4) фотоэлектроны импульсын түгэлтийг Зураг 2 үзүүлэв. Зурагт 2-т импульсын түгэлтийг логарифм утгыг контураар дүрслэсэн ба хэвтээ тэнхлэг нь лазерын тусаж буй чиглэл д харгалзах импульс бол босоо тэнхлэг нь цахилгааны орны туйлшралын чиглэл дэх импульс болно.

Долгион функцын модулын квадрат нь (7) илэрхийлэлээр импульсын түгэлттэй пропорциональ байна. Хугацааны 320 эгшин дэх долгион функцын модулын квадратыг контураар Зураг 3 -т үзүүлэв. Энэхүү зурагаас

үзэхэд фотоэлектроны импульсын түгэлттэй төстэй болох нь харагдаж байна.



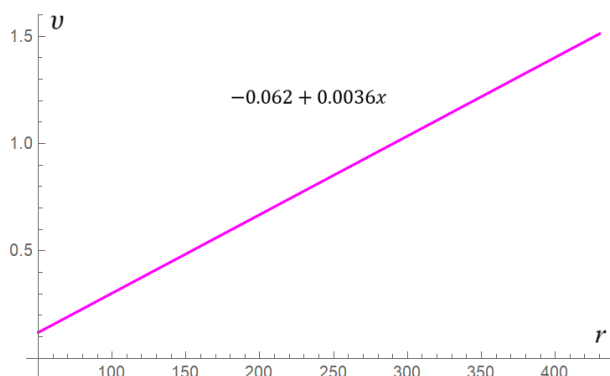
Зураг 3. Долгион функцын модулын квадрат.



Зураг 4. Фаз координатын хамаарал.

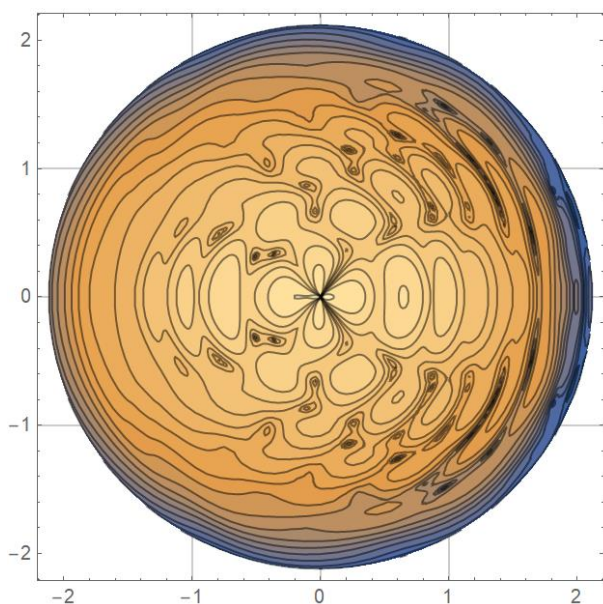
Долгион функцийн фазыг радиал чиглэлийн дагууд янз бүрийн өнцөг дээр тордорхойлон радиусаас хамаарах хамаарлыг зураг 4в -т үзүүлэв. Эндээс харахад фазын радиусын хамаарал чиглэлээс бараг хамаарахгүй ойролцооо болох нь харагдаж байна. Бид Зураг 4а –д лазерын тусаж байгаа чиглэлийн дагуух

фазын графикыг үзүүлсэн ба түүнийг фитинг хийж тасархай шугамаар үзүүллээ.



Зураг 5. Фотозэлектроны хурд координатын хамаарал.

Энэхүү хамаарал нь парабол хэлбэртэй байна. Фитингийн мурийг ашиглан хурдны радиусын хамааралыг гарган авч Зураг 5-т үзүүлэв.



Зураг 6. Долгион функцээр шууд тодорхойлсон Фотозэлектроны импульсын түгэлт.

Зураг 5–т үзүүлсэн хурдны хамааралыг ашиглан долгион функцын (Зураг 2) утгаар (7) фотозэлектроны импульсын түгэлтийг гарган авлаа. Зураг 6. Энэхүү долгион функцээр шууд тодорхойлсон фотозэлектроны импульсын түгэлт (зураг 6) нь амплитудаар тодорхойлсон импульсын түгэлт (Зураг 2) –той максимумуудын байрлал болон хэлбэрийн хувьд маш сайн давхцаж байна.

ДҮГНЭЛТ

Фотозэлектроны иончлолын магадлалын нягтыг квант механикын уламжлалт арга болох амплитудаар болон долгион функцээр нь шууд тодорхойллоо. Лазер устөрөгчийн атомын хувьд энэхүү хоёр аргаар тодорхойлсон иончлолын импульсын түгэлт нь хэлбэр болон максимумын байрлалууд тохирч байна. Устөрөгчийн атомын хувьд иончлолын магадлалын нягтыг шууд долгион функцээр илэрхийлэх боломжтойг харуулж байна. Цаашилбал лазерын пульсээр хүнд атом болон молекулыг иончлох үед энэхүү аргыг ашиглах боломжтой байж болох юм.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] S. Basile, F. Trombetta, and G. Ferrante, Phys. Rev. Lett. **61**, 2435 (1988)
- [2] L. R. Moore, M. A. Lysaght, J. S. Parker, H. W. van der Hart, and K. T. Taylor, Phys. Rev. A **84**, 061404(R) (2011).
- [3] A. N. Grum-Grzhimailo and E. V. Gryzlova, Phys. Rev. A **89**, 043424 (2014).
- [4] A. K. Kazansky, I. P. Sazhina, and N.M. Kabachnik, Phys. Rev. A **82**, 033420 (2010).
- [5] M. Klaiber, K. Z. Hatsagortsyan, and C. H. Keitel, Phys. Rev. Lett. **114**, 083001 (2015).
- [6] K. J. Schafer, B. Yang, L. F. DiMauro, and K. C. Kulander, Phys. Rev. Lett. **70**, 1599 (1993).
- [7] X. M. Tong, K. Hino, and N. Toshima, Phys. Rev. A **74**, 031405(R) (2006).
- [8] D.A. Telnov and Shih I Chu Phys. Rev. A **79**, 043421 (2009)
- [9] M. F. Ciappina, J. A. Perez-Hernandez, T. Shaaran, L. Roso, and M. Lewenstein, Phys. Rev. A **87**, 063833 (2013).
- [10] M. Schuricke, G. Zhu, J. Steinmann, K. Simeonidis A.N. Grum-Grzhimailo Phys. Rev. A **83**, 023413 (2011)
- [11] Z. Chen, T. Morishita, A.T. Le, M. Wickenhauser, X.M. Tong and C.D. Lin Phys. Rev. A **74**, 053405 (2006)
- [12] Mitsuko Murakami, G.P. Zhang and Shih I Chu Phys. Rev. A **95**, 053419 (2017)
- [13] Ч.Алдармаа, Л.Хэнмэдэх, Г.Зоригт Физик сэтгүүл №25 (478) 2017
- [14] Ч.Алдармаа, Л.Хэнмэдэх, Г.Зоригт Физик сэтгүүл №28 (510) 2019
- [15] D. O. Harris, G. G. Engerholm, and W. D. Gwinn, J. Chem. Phys. **43**, 151 (1965).

- [16] *Dickinson* and *Certain* Lebedev discrete variable representation (*DVR*) (*J. Chem. Phys.* 49 4209, 1968)
- [17] Lill.J.V, Parker G.A, Light.J.C, *Chemical Physics Letters*, Volume 89, Issue 6, p. 483-489.1982
- [18] J. C. Light, I. P. Hamilton, and J. V. Lill *Light J. Chem. Phys.* **82**, 1400 (1985)
- [19] К.М.Дунсеат, J.M Launay *Phys B: Mol. Opt. Phys* 35 (2002) 3539-3556
- [20] Schwartz C 1984 *J.Math.Phys* 26, 411
- [21] Г.Зоригт, Л.Хэнмэдэх “Цэнэгт бөөм атомын мөргөлдөөний хугацааны эволюцийн судалгаа” монограф, 2019
- [22] Landau LD, Lifshitz EM 1977 *Quantum mechanics*. Oxford, UK, Pergamon Press