

# Лазерын пульсээр атомыг өдөөх магадлалыг дискрет хувьсагч ба псевдоспектриал аргаар тооцоолох

Ч.Алдармаа\*, Л.Хэнмэдэх, Г.Зоригт

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

Энэхүү ажилд лазерын пульс, атомтай харилцан үйлчлэх процессыг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлж, Дискрет хувьсагчийн арга болон Псевдоспектриал аргаар шийдсэн. Үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атомыг фемтосекундын лазерын хүчтэй пульсээр өдөөх магадлал хугацаанаас хэрхэн хамаарах хамаарлыг тооцоолсон.

PACS numbers: 67.63.Gh, 67.80.Fh, 67.25.dt, 42.60.Rn, 31.55.ee.

## ОРШИЛ

Орчин үед лазерын технологи хурдацтай хөгжиж, эрчим ба давтамж нь өөр лазеруудыг олон лабораторууд гаргаж аваад байна. Лазерын пульс бодистой харилцан үйлчлэх шугаман бус үзэгдлийг судласнаар хими ба физикийн олон тооны сонирхолтой шинж чанарууд илэрдэг [1,2]. Эдгээр шинж чанарууд дээр суурилсан шинэ технологи хурдацтай хөгжиж шинжлэх ухааны шинэ хил хязгаарыг нээсэн. Гэрлийн үүсгүүрийн шинэ технологийг мэдсэнээр атом молекулд явагдах электроны хөдөлгөөний траектор ба дүрслэлийг аттосекундын хувиараар гаргах боломжтой болсон. Шугаман бус ультра ягаан туяаны процессоор олон тооны урвалын нөлөө ба олон биеийн шинж чанарыг туршин ажиглаж нарийн төвөгтэй онолыг тайлбарлаж байна. Их эрчимтэй лазерыг хэрэглэснээр хөндөх онолыг хэрэглэх боломжгүй, Кулоны харилцан үйлчлэл ба лазерын харилцан үйлчлэлийг ижил түвшинд авч үзэх шаардлагатай болсон. Онолын олон аргууд нь янз бүрийн үзэгдлүүдийг тайлбарлахад чиглэгдсэн байдаг. Эдгээр аргуудаас цөөнийг нь дурьдвал мужаас хамаарч хүчтэй орны ойролцоолол [3], олон биеийн хүчтэй орны S матрицын онол [4], R матрицын Флокын арга [5], Флокын ерөнхий онол [6], Хугацаанаас хамаарсан нягтын функционалын онол [7], хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг шууд тоон интегралаар шийдэх [8-11]. Бусад аргуудтай харьцуулахад хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг шууд шийдсэнээр өргөн мужид лазерын параметрийн туршилт хэмжилтийн тайлбарлах ба таамаглах тал бүрийн үр ашигтай. Ялангуяа лазерын пульсын урт цөөн цикл ба дэд фемтосекундын

мужид ойртох үед хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр шийдэхэд илүү тохиромжтой байна. Энэхүү ажилд атто ба фемтосекундын лазерын пульсээр, устөрөгчийн атомыг өдөөх процессыг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлж, уг тэгшитгэлээ Дискрет хувьсагчийн арга ба псевдоспектриал аргаар шийдсэн.

## ОНОЛ

Хүчтэй лазерын оронд байгаа атомын электроны хувьд Шредингерийн тэгшитгэлийг бичвэл [12]:

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

$\Psi(\vec{r}, t)$ -атомын электроны долгион функц,  $\hat{H}_0$ - атомын гамилтонион,  $V(\vec{r}, t)$  -лазер атомын харилцан үйлчлэл. Лазер-атомын харилцан үйлчлэлийг диполийн ойролцоололд уртын тохируулгаар сонгон авч үзсэн.

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

$E(t)$  - лазерын цахилгаан орон. Лазерын цахилгаан орон:

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

$E_0$  - лазерын цахилгаан орны далайц,  $\tau$  - пульсийн үргэлжлэх хугацаа,  $\omega$  - давтамж. Шредингерийн тэгшитгэлээс хугацааны  $t$  эгшинээс  $t + \Delta t$  эгшинд долгион функцийг олбол [13]:

$$\Psi(\vec{r}, t + \Delta t) = e^{-i(\hat{H}_0 + \hat{V}(\vec{r}, t))\Delta t} \Psi(\vec{r}, t) \quad (4)$$

Хугацааны итерацийн алхамуудаар долгион функцийг хугацааны хамаарал тодорхойлогдоно. Тухайн алхмыг гүйцэтгэхэд  $\Delta t$  хугацааны алхам

\* Electronic address: aldaraa2004@yahoo.com

бага үед хугацааг хуваах Странгийн аргыг хэрэглэх боломжтой юм. Хугацааг хуваах аргыг ашиглан хугацаанаас хамаарсан ба хамаараагүй операторуудыг салган бөмбөлөг координатын системд долгион функц нь :

$$\Psi(r, \theta, \varphi, t + \Delta t) \cong \exp\left(-i\hat{V}(r, \theta, \varphi, t + \Delta t)\frac{\Delta t}{2}\right) \times \exp(i\hat{H}_0\Delta t) \times \exp\left(-i\hat{V}(r, \theta, \varphi, t)\frac{\Delta t}{2}\right) \Psi(r, \theta, \varphi, t) \quad (5)$$

Долгион функцыг бөмбөлөг координатын системд координатуудыг дискретчилэн сфер гармоник функцын баазаар задлан бичвэл:

$$\Psi(r_i, \theta_j, \varphi_k, t) = \sum_{l=0}^{l_{max}} \sum_{m=-l}^l R_{l,m}(r_i, t) Y_{l,m}(\varphi_k, \theta_j) \quad (6)$$

$Y_{l,m}(\varphi_k, \theta_j)$  сфер гармоник,  $R_{l,m}(r_i, t)$  радиал функц. Энэхүү функцээ (1) тэгшитгэлд орлуулбал бөмбөлөг координатын системд өнцгийн ба радиал тэгшитгэлүүд болон задарна. Өнцгийн тэгшитгэлийн хувьд  $\hat{L}^2$  операторын хувийн функцүүд нь  $Y_{l,m}(\varphi, \vartheta)$  сфер гармоник ба хувийн утгууд нь  $l(l+1)$  болно. Радиал тэгшитгэл нь хугацаанаас хамаарах ба зөвхөн радиал функцийг тодорхойлно. Радиал функц буюу долгион функцын сфер функцээр задалсан задаргааны коэффициентыг өнцгийн интегралаар тооцоолон гаргах ба энд интегралыг квадратур ашиглан бичвэл:

$$R_{l,m}(r_i, t) = \sum_{k=1}^{k_{max}} \sum_{j=1}^{j_{max}} \psi(r_i, \theta_j, \varphi_k, t) Y_{l,m}^*(\varphi_k, \theta_j) w_k w_j \quad (7)$$

$w_k, w_j$  эдгээр нь Симпсоны ба Гаусс-Лежандрын жингүүд  $j_{max}$   $\theta$  өнцгийн зангилааны тоо,  $k_{max}$   $\varphi$  өнцгийн зангилааны тоо болно.

#### А. ДИСКРЕТ ХУВЬСАГЧЫН АРГА (ДХА)

Кулоны долгион функцыг сонгон язгууруудаар нь радиал зангилааны цэгүүдийг авч радиал функцыг кардинал функцүүдээр илэрхийлсэн интерполяцын функцыг гарган авч радиал тэгшитгэлд орлуулан тооцоолно. Кулоны функцыг  $F(r)$  түүний уламжлалыг  $F'(r)$  гээд  $\frac{R_{l,m}(r_i, t)}{F'(r)} = \phi_{k,j}$  гэвэл атомын гамилтанионтой стационар тэгшитгэлээс нь дараах шугаман тэгшитгэлийг гаргаж болно.

$$\sum_{j=1}^N \left[-\frac{1}{2} D_{i,j} + V_l(r_j) \delta_{i,j}\right] \phi_{k,j} = \varepsilon_k \phi_{k,i} \quad (8)$$

$i = 1 \dots N$

Энд:  $\phi_{k,i}$  хувийн функцын ( $k$ -р спектрийн  $j$ -р) утга,  $\varepsilon_k$  хувийн утга ( $k$ -р спектрийн энерги)  $D_{i,j}$  координатын 2-р эрэмбийн уламжлалыг тодорхойлох матриц

$$D_{i,j} = \frac{1}{3} \left(E + \frac{Z1}{r_i}\right) \delta_{i,j} + (1 - \delta_{i,j}) \frac{1}{(r_i - r_j)^2} \quad (9)$$

$E$  электроны кинетик энерги,  $Z1$  кулоны функцын цэнэг,  $V_l(r_j)$  координатаас хамаарсан потенциал.  $V_l(r_j) = \frac{l(l+1)}{2r_j^2} - \frac{Z}{r_j}$ ,  $l$  - орбитын квант тоо. (14) нь шугаман тэгшитгэлийн систем үүсгэх учир  $l$ -н утга бүрд харгалзах тэгшитгэлийн системийг бодож, радиал зангилааны тоотой тэнцүү тооны хувийн утга ба хувийн векторуудыг олно. Энэхүү хувийн векторууд нь псевдоспектрүүдэд харгалзах бүрэн бааз болно. Хугацаанаас хамаарсан долгион функцын радиал функцыг координатын төлөөллөөс псевдоспектриал бааз дээр задлах буюу энергийн төлөөлөлд шилжүүлээд  $\hat{H}_0$  оператороор үйлчлэхэд задаргааны гишүүн бүрийн хувьд харгалзах хувийн утга үржигдэн гарах ба буцааж координатын төлөөлөлд шилжих үйлдэл нь тогтмол утгатай хувьслын матрицаар үйлчилсэнтэй адил болно. Иймд (5) тэгшитгэлийн  $\hat{H}_0$  операторын үйлчлэлийг тооцоолохдоо долгион функцээс (6) илэрхийллээр радиал функцын утгуудыг тодорхойлон (10) илэрхийлэлээр гүйцэтгэх ба  $S_{ij}(l)$  хувийн утгуудаар тодорхойлогдох хувьсалын матриц болно.

$$\exp(-iH_l^0 \Delta t) R_{l,m}(r_j, t) \Big|_i = \sum_{j=1}^N S_{ij}(l) R_{l,m}(r_j, t), \quad (10)$$

Хувьсалын матриц нь:

$$S_{ij}(l) = \sum_k \phi_{k,j}(l) \phi_{k,i}(l) \exp(-i\varepsilon_k(l) \Delta t) \quad (11)$$

$\chi_{ki}$  хувийн функцын ( $k$ -р спектрийн  $j$ -р) утга,  $\varepsilon_k$  хувийн утга ( $k$ -р спектрийн энерги).

#### В. ПСЕВДОСПЕКТРИАЛ АРГА

Радиал долгион функцыг Лежандрын олон гишүүнтийн нийлбэр байдлаар сонгон авсан.

$$\Psi(r_i, \theta_j, t) = \sum_{l=0}^{l_{max}} g_l(r_i) P_l(\cos \theta_j) \quad (12)$$

$P_l$  -Лежандрын олон гишүүнт,  $g_l(r_i)$  Гаусс-Лежандрын квадратураар олбол:

$$g_l(r_i) = \sum_{k=1}^{L+1} w_k P_l(\cos\theta_k) \Psi(r_i, \theta_k, t) \quad (13)$$

$r$ -ийн  $(0, r_{max})$  мужийг  $x$  нь  $(-1, +1)$  мужид утга авахаар шугаман бус хувиргалт авья.

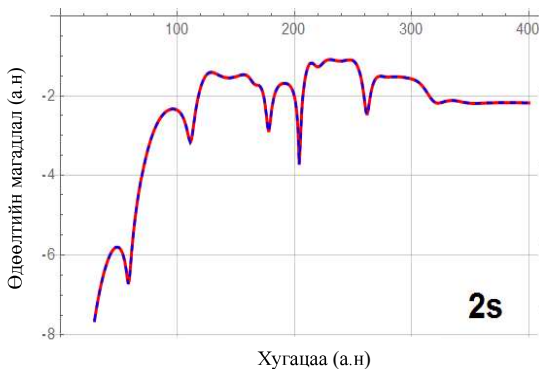
$$r = r(x) = L \frac{1+x}{1-x+a} \quad a = \frac{2L}{r_{max}} \quad (14)$$

Шугаман бус хувиргалтын функц коэффициент  $L$ -ийг багасгахад илүү хотойж  $r$ -ийн бага утгуудад олон зангилаа цэг авах боломжийг олгодог. Шредингерийн дифференциал тэгшитгэл нь алгебрийн тэгшитгэлд шилжих учир  $H_0$  операторын хувийн утга  $E_k(l)$  болон хувийн векторыг  $X_k(l)$  олсон.

Тодорхойлогдсон хувийн утгууд нь атомын спектртэй харьцуулахад шууд давхцахгүй боловч ойролцоо спектрийг үзүүлдэг. Псевдоспектрүүд нь холбоос төлөв болон тасралтгүй төлөвүүдэд харгалзах дискрет спектрүүд байна. Энэ нь хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийн шийдийг хурдан тооцоолох боломжийг олгодог.

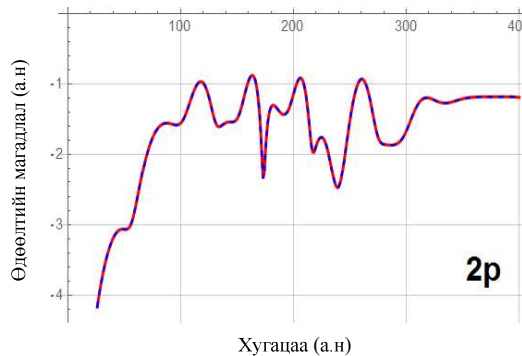
**ҮР ДҮН**

Үндсэн төлөвтөө байгаа устөрөгчийн атомыг  $I = 10^{15}$  Вт/см<sup>2</sup> эрчимтэй, 4 циклтэй, 0.3 а.н давтамжтай 2.026 фемтосекундын лазерын пульсээр өдөөх процессыг дискрет хувьсагчийн арга ба псевдоспектриал аргаар хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг Математика програмаар тооцоолоход дараах үр дүн гарлаа. Дискрет хувьсагчийн арга ба псевдоспектриал аргууд S ба P төлөвт өдөөгдөх үр дүн сайн тохирч байгааг Зураг 1 ба Зураг 2 -т үзүүлээ.

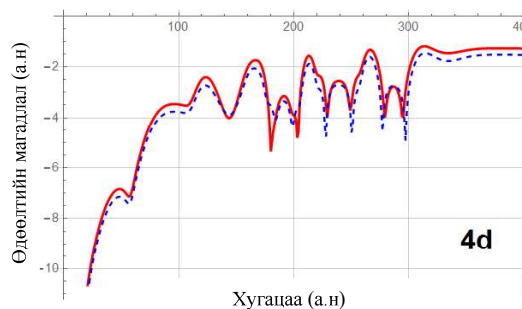


Зураг 1. 2S төлөвийн өдөөлтийн магадлал хугацаанаас хамаарах хамаарал (шулуун-ПСА, цэг-ДХА)

Дискрет хувьсагчийн арга ба псевдоспектриал аргууд S ба P төлөвт өдөөгдөх үр дүн сайн тохирч байгааг Зураг 1 ба Зураг 2 -т үзүүлээ.

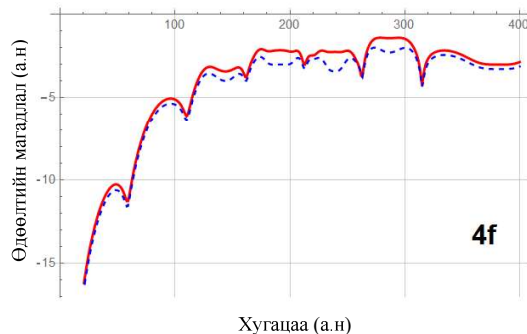


Зураг 2. 2P төлөвийн өдөөлтийн магадлал хугацаанаас хамаарах хамаарал (шулуун-ПСА, цэг-ДХА)



Зураг 3. 4D төлөвийн өдөөлтийн магадлал хугацаанаас хамаарах хамаарал (шулуун-ПСА, цэг-ДХА)

Атомын D ба F төлөвт өдөөх магадлал нь Зураг 3 ба Зураг 4 үзэхэд хоорондоо бага зэрэг зөрүүтэй гарсан бөгөөд энэхүү зөрүү нь хоёр аргын сонгож авсан бааз функцээс болсон гэж үзэж байна.



Зураг 4. 4F төлөвийн өдөөлтийн магадлал хугацаанаас хамаарах хамаарал (шулуун-ПСА, цэг-ДХА)

Устөрөгчийн атомын 2S, 2P, 3D, 4F, 5G төлөвт өдөөх магадлал болон иончлолын магадлалыг тооцоолж [15] ажлын үр дүнтэй тохируулж Хүснэгт 1 -т үзүүлээ.

Хүснэгт 1. Устөрөгчийн атомын өдөөлтийн магадлал

Н	Madness [15]	Бидний тооцоолол [ПСА]	Бидний тооцоолол [ДХА]
1s	0.976	0.978	0.978
2s	$2.09 \times 10^{-5}$	$1.78 \times 10^{-5}$	$1.83 \times 10^{-4}$
2p	$5.03 \times 10^{-3}$	$4.63 \times 10^{-3}$	$4.69 \times 10^{-2}$
3d	$1.17 \times 10^{-6}$	$0.98 \times 10^{-6}$	$1.03 \times 10^{-5}$
4f	$2.4 \times 10^{-7}$	$5.74 \times 10^{-11}$	$6.16 \times 10^{-8}$
5g	$10^{-13}$	$1.11 \times 10^{-15}$	$1.21 \times 10^{-12}$
P <sub>bound</sub>	0.0076	0.006998	0.001342
P <sub>ion</sub>	0.016	0.01469	0.01143

## ДҮГНЭЛТ

Үндсэн төлөвт байгаа устөрөгч атомтай хүчтэй лазерын пульстэй үйлчлэхэд тодорхой төлөвүүдэд өдөөх магадлал хугацааны хамаарлыг дискрет хувьсагчийн арга ба псевдоспектриал аргаар хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг бодож бусад ажлуудтай үр дүнтэй харьцууллаа. Өдөөлтийн магадлал хугацааны хамаарал нь S ба P төлөвт тохирч, D ба F төлөвт бага зэрэг зөрүү гарсан. Өдөөлтийн магадлал нь пульсын урт болон лазерын эрчмээс хамаарах бөгөөд лазерын эрчим өсөхөд магадлал ихсэж, эхний төлөвт үлдэх магадлал багасаж ажиглагдлаа. Хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг бодсон дискрет хувьсагч ба псевдоспектриал аргаар тооцоолсон үр дүн нь MADNESS (Multiresolution ADaptive Numerical Environment for Scientific Simulation) мультивэйвлет баазаар [15] бодсон үр дүнтэй тохирч байна.

## НОМ ЗҮЙ

[1] J.L.Hansen, L.Holmegaard, J.H.Nielsen, H.Stapelfeldt and L.B.Madsen, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 45, 015101 (2012).

- [2] C.D.Lin, T.Morishita, R.Lucchese, A-T. Le, Z.Chen, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43, 122001(2010).
- [3] M. V. Ammosov, N. B. Delone, and V. P. Krainov, Sov. Phys. JETP 64, 1191, 1986.
- [4] A. Becker and F. H. M. Faisal, J. Phys. B 38, R18, 2005.
- [5] P.G.Burke and V.M.Burke, J.Phys. B 30, L383, 1997.
- [6] S. I. Chu and D.A.Telnov, Phys. Rep. 390, 2004.
- [7] M. A. L. Marques and E. K. U. Gross, Annu. Rev. Phys. Chem. 55, 427, 2004.
- [8] K. C. Kulander, Phys. Rev. A 35, 445, 1987.
- [9] H. G. Muller, Laser Phys. 9, 138, 1999; D. Bauer and P. Koval, Comput. Phys. Commun. 174, 396, 2006.
- [10] E. S. Smyth, K. T. Taylor, J. S. Parker, D. Dundas, K. J. Meharg, L.-Y. Peng, B. J. S. Doherty, and J. F. McCann, Phys. Scr., T 110, 154, 2004.
- [11] L.-Y. Peng, J. F. McCann, D. Dundas, K. T. Taylor, and I. D. Williams, J. Chem. Phys. 120, 10046, 2004.
- [12] Л.Д.Ландау, Е.М. Лифшиц, Физика III, Москва (1974).
- [13] Xiao-Ming Tong, Shih, Chemical physics 217 (1997).
- [14] Liang-You Peng, and Anthony F Starace, The journal of chemical physics 125, 54311(2006).
- [15] Nicolas Vence, Robert Harrison and Predrag Krstic, Physical reiveiw A 85, 033403, 2012.