

# Гелийн атомын фотоэлектроны голограф

Ч.Алдармаа\*, Г.Зоригт, Л.Хэнмэдэх

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

Гелийн атомыг лазерын богино хүчтэй пульсээр иончлох процессыг Кулоны долгион функцын дискрет хувьсагчийн арга (CWDVR) ашиглан хувьсах эффектив цэнэгтэйгээр хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг тоон аргаар бодлоо. Шугаман туйлшралтай лазерын богино хүчтэй пульсээр гелийн атомыг үйлчлэхэд сугаран гарч буй фотоэлектроны импульсын түгэлт буюу голографын дүрслэлийг гарган авсан.

PACS numbers: 42.55-f, 32.80-t, 31.15E-

## ОРШИЛ

Атом молекулын олон фотоны болон өндөр эрэмбийн шугаман бус оптик процессын судалгаа нь шинжлэх ухаан, технологийн өнөөгийн сонирхолтой сэдвүүдийн нэг юм. Атом молекулд явагдах процесс нь фемтосекундээс аттосекундын хугацаанд үргэлжилдэг. Иймд атомыг лазерын богино хүчтэй пульсээр үйлчилж фотоэлектрон нь ямар чиглэлд, ямар магадлалтай гарч буйг тодорхойлох нь энэ төрлийн судалгаанд чухал ач хобогдолтой юм. Орчин үед атом молекулд лазерын богино хүчтэй пульсээр үйлчлэх процессыг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг тоон аргаар тооцоолох ажил олон хийгдэж байна. Устөрөгчийн атомын фотоэлектроны импульсын түгэлтийг (PMD) тооцоолох онолын олон аргууд байдагаас хөндөх онолоор [1], хүчтэй орны ойролцооллоор [2,3], хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэл [4,5] гэх мэт тодорхой дөхөлтийн хүрээнд тооцоолсон бол олон электронтой атомын хувьд нэг идэвхитэй электроны ойролцооллоор (SAE)[6-8], нягтын функционалын онолоор [9]-д тус тус тооцоолсон байна. Эдгээрээс гелийн атомыг шугаман туйлширсан лазерын пульсээр иончлох процессыг хугацаанаас хамаарсан нягтын функционалын онолоор [10], Хе атомыг лазерын богино пульсын фотоэлектроны импульсын түгэлт буюу голографыг туршилгаар хэмжиж онолын тооцоололтой харьцуулжээ [11]. Бид өмнө нь гелийн атомын хоёр электроныг хоёулаа  $1s$  төлөвт байна гэж үзээд Кон-Шамын тэгшитгэлийг хугацаанаас хамаарсан нягтын

функционалын аргаар бодсон [12]. Энэхүү ажилдаа гелийн атомыг шугаман туйлширсан лазерын пульсээр үйлчилж нэг идэвхитэй электронтой нөгөө электрон нь хувьсах эффектив цэнэгийн орон үүсгэнэ гэж үзээд хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг Кулоны долгион функцын дискрет хувьсагчийн аргыг ашиглан тоон аргаар тооцоолсон үр дүнг танилцуулж байна. Энэ ажилд атом нэгжийн системийг ашигласан болно.

## ОНОЛ

Хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр гелийн атомыг лазерын богино хүчтэй пульсээр үйлчлэх үед нэг идэвхитэй электрон нь хувьсах эффектив цэнэгтэй цөмийн оронд байна гээд Гамильтонионыг бичвэл [13]:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + V_{\text{эфф}}(r) + \vec{r} \cdot \vec{E}(t) \quad (1)$$

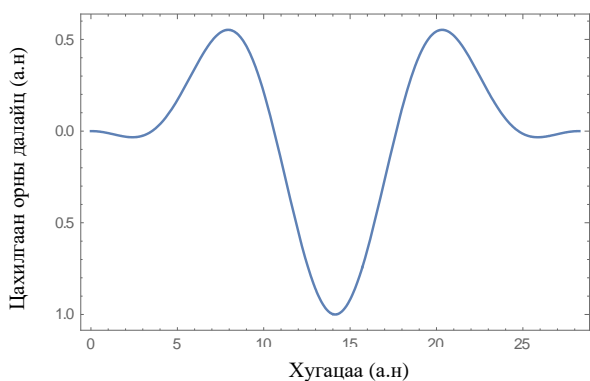
Энд  $\frac{\hat{p}^2}{2}$  –кинетик энергийн оператор,  $V_{\text{эфф}}$  – электрон ба үлдэгдэл ионы хоорондох харилцан үйлчлэл,  $\vec{r} \cdot \vec{E}(t)$  – уртын тохируулгатай диполын ойролцоолол дахь гадны орны харилцан үйлчлэлийн потенциал.

Лазерын цахилгаан орон:

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

$E_0$  –лазерын цахилгаан орны далайц,  $z$ - ийн дагуу шугаман туйлширсан,  $\tau$  –пульсын урт,  $\omega$  – давтамж,  $\phi_0 = -\frac{\omega\tau}{2} - \frac{\pi}{2}$ .

\* Electronic address: aldaraa2004@yahoo.com



Зураг 1. Лазерын цахилгаан орны хугацааны хамаарал ( $I = 3.51 \cdot 10^{16}$  Вт/см<sup>2</sup>,  $N = 2$  циклтэй,  $\omega = 0.4445$  а.н).

Эффектив потенциал:

$$V_{\text{эфф}}(r) = -\frac{Z_c + a_1 e^{a_2 r} + a_3 r e^{a_4 r} + a_5 e^{a_6 r}}{r} \quad (3)$$

гелийн атомын хувьд параметруудийг  $Z_c = 1$ ,  $a_1 = 1.231$ ,  $a_2 = 0.662$ ,  $a_3 = -1.325$ ,  $a_4 = 1.236$ ,  $a_5 = -0.231$ ,  $a_6 = 0.480$  байхаар сонгож авлаа [14]. Шредингерийн тэгшитгэлээс хугацааны  $t$  эгшинээ  $ct + \Delta t$  эгшин дэх долгион функцыг олбол [15]:

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

Энэхүү итерацийн алхмуудаар долгион функцын хугацааны хамаарал тодорхойлогдоно. Электроны долгион функцыг бөмбөлөг координатын системд бөмбөлөг гармоник функцээр задлан радиал функцийг хугацаанаас хамааруулан тооцоолов. Радиал координатыг Кулоны долгион функцын язгууруудаар радиал координатыг дискретчилэн устөрөгчийн атомын псевдо спектрал баазуудыг байгуулсан [16]. Фотоэлектроны импульсын түгэлтийг тодорхойлохын тулд хугацаанаас хамаарсан долгион функцыг эффектив цэнэгтэй Кулоны континуумын долгион функц дээр проекцлолоо. Үүнд

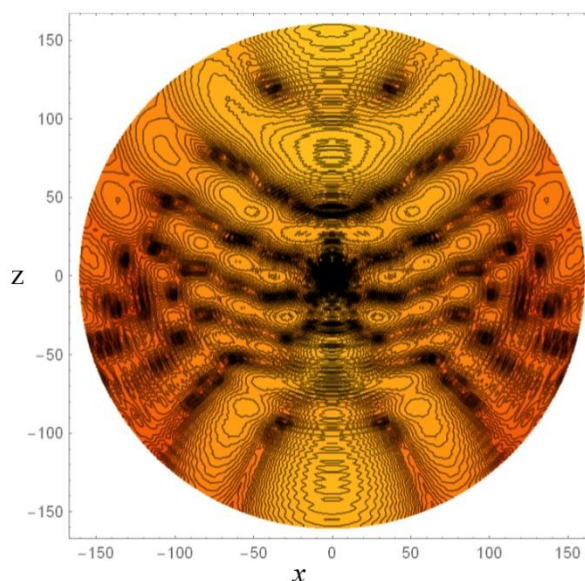
$$\frac{dP}{d\epsilon d\Omega_k} = \lim_{t \rightarrow \infty} |\langle \Phi_k^-(\mathbf{r}) | \Psi(\mathbf{r}, t) \rangle|^2 \quad (5)$$

Устөрөгчийн атомын континуумын долгион функц  $\Phi_k^-(\mathbf{r})$ -ийн аналитик илэрхийлэлийг ашиглав.

## ҮР ДҮН

Гелийн атомыг шугаман туйлширсан  $3.51 \cdot 10^{16}$  Вт/см<sup>2</sup> эрчимтэй 2 циклтэй,  $\omega = 0.4445$  давтамжтай лазерын пульсээр үйлчилж

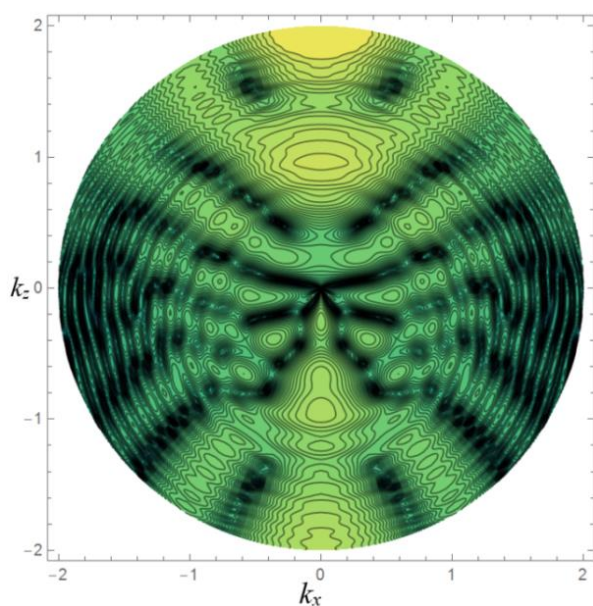
хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг Кулоны долгион функцын дискрет хувьсагчийн аргыг ашиглан долгион функцыг тоон аргаар тооцоолж гаргав. Лазерын пульсын урт 28.27, хугацааны итерацыг  $\Delta t = 0.1$  алхамтайгаар шилжүүлэн орбитын квант тооны хамгийн их утгыг 40-өөр авч тооцооллыг хийв.  $z$  тэнхлэгийн дагуу лазерийн цахилгаан орон хэлбэлзэх үед долгион функцын модулын квадратын логарифм утгыг ( $z, x$ ) хавтгай дээр зураг 2-д дүрслэн харууллаа.



Зураг 2. Электроны магадлалын нягтын түгэлт.

Зураг 2-д үзүүлсэн электроны магадлалын нягтын түгэлт нь гелийн атомын идэвхитэй электрон лазерын цахилгаан орны үйлчлэлээр шууд иончлогдох пульс, буцаж цөмтэйгээ харилцан үйлчилж гарах пульсүүдийн интерференцийн зураглал буюу голограф юм. Энэ нь лазерын пульс атомтай харилцан үйлчилж дуусах эгшинд харгалзах электрон үүлний голограф болно. Голограф нь шууд туршлагаар ажиглагдахгүй боловч импульсын түгэлтийг туршилгаар хэмжих боломжтой. Импульсын түгэлтийг долгион функцыг континуумын долгион функцэд проекцлох замаар тодорхойлсныг Зураг 3-т үзүүлэв. Фотоэлектроны импульсын түгэлт (Зураг 3) нь электроны магадлалын нягтын түгэлт (Зураг 2) -той хэлбэрийн хувьд төсөөтэй болох нь харагдаж байна. Бидний гарган авсан фотоэлектроны импульсын түгэлт нь бусад онолын судалгааны [13,17] ажлуудын үр дүнтэй тохирч байна. Цаашид энэ аргаар инертийн хийн

атомуудын хувьд фотоэлектроны импульсын түгэлтийг тооцоолох боломж бүрдэж байна.



Зураг 3. Фотоэлектроны импульсын түгэлт.

### ДҮГНЭЛТ

Шугаман туйлширсан лазерын пульс нь электрон үүлийг  $z$  тэнхлэгийн дагуу хүчтэй савлуулсны үр дүнд шууд иончлогдох электроны пульс болон буцаж цөмтэй харилцан үйлчилсний дүнд иончлогдох пульсүүд фазын хувьд зөрснөөр интерференц үүсгэж байна. Туршлагаар импульсын түгэлтийг тодорхойлсноор электроны магадлалын нягтын түгэлтийг гарган авах боломжтой буюу голографын зураг авсантай адилхан үр дүнд хүрч байна.

### АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [1] Alexei N.Grum- Grzhimailo, and E.V. Gryzlova, Phys.Rev. A 89, 043424 (2014)
- [2] A. K. Kazansky, I. P. Sazhina, and N.M. Kabachnik, Phys. Rev.A82, 033420 (2010).
- [3] M. Klaiber, K. Z. Hatsagortsyan, and C. H. Keitel, Phys. Rev.Lett. 114, 083001 (2015).
- [4] K. J. Schafer, B.Yang, L. F. DiMauro, and K. C.Kulander, Phys.Rev. Lett. 70, 1599 (1993).
- [5] X.M.Tong, K.Hino, and N.Toshima, Phys. Rev. A 74,031405(R) (2006).
- [6] Y.Huismans, A.Rouzee, A,Gijsberten, P.S. W.M. Logman, F. Lepine, C.Cauchy at all, Phys.Rev. A87, 033413 (2013)

- [7] M.Schuricke, G.Zhu, J.Steinmann, K. Simeonidis A.N. Grum-Grzhimailo Phys.Rev A83, 023413 (2011)
- [8] Z.Chen, T.Morishita, A.T. Le, M.Wickenhauser, X.M.Tong and C.D. Lin Phys. Rev A74, 053405 (2006)
- [9] U.De Giovannini, D.Varsano, M.A.L, Marques, H.Appel, E.K. Gross and Rubio, Phys.Rev. A85, 062515 (2012)
- [10] Mitsuko Murakami, Shih I Chu Phys.Rev A95, 053419 (2017)
- [11] Y. Huismans et al. Science 331, 61 (2011)
- [12] Ч.Алдармаа, Г.Зоригт, Л.Хэнмэдэх, ШУТИС-ийн эрдэм шинжилгээний бичиг №(XX/XXX) 2021 хэвлэлтэнд.
- [13] S.Borbely, A.Toth, D.G. Arbo, k.Tokesi and L.Nagy, Phys.Rev A99, 013416 (2019)
- [14] X. M. Tong and C. D. Lin, J. Phys. B 38, 2593 (2005).
- [15] Xiao-Min Tong, Shih I Chu, The journal of chemical physics 217 (1997) 119-130
- [16] Peng, Liang-You and Starace, Anthony F., The journal of chemical physics 125,154311. 2006.
- [17] Mitsuko Murakami, Oleg Korobkin and Guo-Ping Zhang Phys. Rev. A 101, 063413 (2020).