

Фемтосекундын лазерын пульсээр атомыг иончлох магадлалыг тооцоолох

Ч. Алдармаа*, Л. Хэнмэдэх, Г. Зоригт

ШУТИС, Хэрэглээний Шинжлэх Ухааны Сургууль, Физикийн тэнхим

Энэхүү ажилд фемтосекундын лазерын пульс, атомтай харилцан үйлчлэлийг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлж Кулоны дискрет хувьсагчийн аргаар шийдсэн. Үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атом хүчтэй лазерын пульсын үйлчлэлээр иончлогдох магадлал сугаран гарах электроны кинетик энергис хэрхэн хамаарах хамаарлыг тооцоолж, Alexei N. Grum-Grzhimailo нарын ажил болон Хүчтэй орны ойролцоолол, Кулон Волковын ойролцоолол аргуудаар бодсон үр дүнтэй харьцуулан дүн шинжилгээ хийлээ.

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

I. ОРШИЛ

Лазерын богино хүчтэй пульсийг тулгуур болон технологийн судалгаанд өргөн хэрэглэж байна. Атом, молекулд явах үзэгдэл хувирал нь асар богино фемто болон аттосекундын эрэмбэтэй буюу хугацаанд үргэлжилдэг. Иймд химийн урвалын өрнөл хувирлын процессын шинж чанарыг лазерын богино пульсээр тандан судлах нь атом молекулын судалгааны шинэ чиглэл болоод байна [1,2]. Лазерын пульсийн уртыг хэдхэн аттосекундын хэмжээнд хүртэл богиносгож чадвал молекул төдийгүй, атом дотор явагдах процессын дөрвөн хэмжээст дүрслэлийг гарган авах боломжтой болно. Хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг тоон аргаар шийдэх замаар лазер атомын харилцан үйлчлэлийг зүй тогтлыг илэрхийлэх нь онолын тулгуур арга юм. Хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг орчин үед хөгжиж буй гурван хэмжээст торын арга, бас бааз функцээр задлах аргаар бодож байна. Бааз функцыг сонгохдоо Лежандрын олог гишүүнт [3] эсвэл Волковын [4] функц болон бусад [5,6] функцыг ашиглан хугацаанаас хамаарсан хоёрдугаар эрэмбийн дифференциал тэгшитгэл гарган авч, уг радиал систем тэгшитгэлийн шийдийг тооцооллын аргаар тодорхойлж байна. Торын аргаар бодохдоо төгсгөлөг ялгавар [7,8] тоон базис [9], төгсгөлөг элемент [10], В-сплайныг [11] ашиглан тооцоог хийсэн байна. Энэхүү ажилд фемтосекундын лазерын пульсээр, устөрөгчийн атомыг иончлох процессыг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлж, уг тэгшитгэлээ Кулоны Дискрет хувьсагчийн аргаар шийдсэн. Тооцооллын үр дүнг Хүчтэй орны ойролцоолол, Кулон

Волковын ойролцоо аргуудаар ойролцоолж бодсон үр дүнтэй харьцуулав.

II. 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 гамилтанион, $V(\vec{r}, t)$ -лазер атомын харилцан үйлчлэл. Лазер-атомын харилцан үйлчлэлийг диполийн ойролцоололд уртын тохируулгаар сонгон авбал:

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

$E(t)$ -лазерын цахилгаан орон. Лазерын цахилгаан орныг синус квадрат хүрээтэйгээр сонгон авбал [13].

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

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

A. ДИСКРЕТ ХУВЬСАГЧЫН АРГА (ДХА)

Шредингерийн тэгшитгэлээс хугацааны t эгшинээс $t + \Delta t$ эгшинд долгион функцыг олбол [14]:

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

Энэхүү итерацийн алхамуудаар долгион функцын хугацааны хамаарал тодорхойлогдоно. Тухайн алхмыг гүйцэтгэхэд Δt хугацааны алхам бага үед хугацааг хуваах Странгийн аргыг хэрэглэх боломжтой юм. Хугацааг хуваах аргыг ашиглан хугацаанаас хамаарсан ба хамаараагүй

* Electronic address: aldaraa2004@yahoo.com

операторуудыг салган бөмбөлөг координатын системд долгион функцыг тодорхойлбол [3]:

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

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

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

$Y_{l,m}(\varphi_k, \theta_j)$ сфер гармоник, $R(r_i, t)$ 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 [15]. 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:

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

w_k, w_j эдгээр нь Симпсоны ба Гаусс-Лежандрын жингүүд $jmax$ θ өнцгийн зангилааны тоо, $kmax$ φ өнцгийн зангилааны тоо болно. Кулоны функц сонгон язгууруудаар нь радиал зангилааны цэгүүдийг авч радиал функцыг кардинал функцүүдээр илэрхийлсэн интерполяцын функцыг гарган авъя. Интерполяцын функцыг 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.

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

Энд: $\phi_{k,i}$ хувийн функцын (k -р спектрийн j -р) утга, ε_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. (8) 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 псевдоспектруудад 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.

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

Хувьсалын матриц нь:

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

χ_{ki} хувийн функцын (k -р спектрийн j -р) утга, ε_k хувийн утга (k -р спектрийн энерги).

Б. ХҮЧТЭЙ ОРНЫ ОЙРОЛЦООЛОЛ (ХОО)

Цөмийн үүсэх цахилгаан орон нь лазерин цахилгаан орноос олон дахин бага үед $\left|\frac{Z}{r}\right| \ll |\vec{r} \cdot \vec{E}(t)|$ Кулоны потенциалыг (1) тэгшитгэлд тооцохгүй орхиж болно [16]. Энэ тэгшитгэл нь лазерин хүчтэй орон дахь чөлөөт бөөмийн Шредингерийн тэгшитгэл бөгөөд тэгшитгэлийн шийдийг Волковын долгион функцээр илэрхийлж болно. Волковын долгион функц:

$$\Psi_f(\vec{r}, t) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\{i[\vec{k} + \vec{A}(t)] \cdot \vec{r} - i \cdot S(\vec{k}, t)\} \quad (12)$$

$\vec{k}$ - электроны импульс, $S(\vec{k}, t)$ - фаз

$$S(\vec{k}, t) = \frac{1}{2} \int_0^t dt' [\vec{k} + \vec{A}(t')]^2 = \quad (13)$$

$$\frac{k^2}{2} + \int_0^t dt' (\vec{k} \cdot \vec{A}(t') + \vec{A}(t')^2)$$

$\varepsilon_f = \frac{k^2}{2}$ - электроны кинетик энерги,

$a(\vec{k}, \tau)$ - иончлолын амплитуд

$$a(\vec{k}, \tau) = -(2\pi)^{-3/2} \int_0^\tau dt \vec{E}(t) \langle \Psi_f | \vec{r} | \Psi_i \rangle \quad (14)$$

(14) –т байгаа матрицын элементийг бодохын тулд Фурье хувиргалтыг ашиглая. Эхний төлөвийн долгион функций Фурье дүр нь:

$$\Psi_i(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r} \Psi_i(r) e^{i\vec{p}\vec{r}} = \frac{2\sqrt{2}}{\pi(p^2 + 1)^2}. \quad (15)$$

Матрицын элементийг энэхүү Фурье дүрийн уламжлалаар илэрхийлж болно.

$$(2\pi)^3 \frac{d}{d\vec{p}} \Psi_i(\vec{p}) = i \int e^{i\vec{p}\vec{r}} \vec{r} \Psi_i d^3r \quad (16)$$

(15)-аас р хувьсагчаар уламжлал авбал:

$$a(\vec{k}, \tau) = \frac{d}{d\vec{p}} \Psi_i(\vec{p}) = \frac{-4(\vec{k} + \vec{A}(t))2\sqrt{2}}{\pi((\vec{k} + \vec{A}(t))^2 + 1)^3}. \quad (17)$$

илэрхийлэл гарна. Энд

$$\frac{dP}{dEd\Omega} = 2k |a(\vec{k}, \tau)|^2. \quad (18)$$

В. КУЛОН-ВОЛКОВЫН ОЙРОЛЦООЛОЛ (КВО)

Цөмийн үүсгэх цахилгаан орон нь лазерын цахилгаан оронтой ойролцоо $\left| \frac{Z}{r} \right| \approx |\vec{r} \cdot \vec{E}(t)|$ үед (1) тэгшитгэлийн шийдийг Кулон-Волковын долгион функцээр илэрхийлж болно. Кулон-Волковын долгион функц [17].

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \Phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \Psi_V(\vec{k}, \vec{r}, t) \quad (19)$$

$\Psi_V(\vec{k}, \vec{r}, t)$ - Волковын долгионы функц, $\Phi_{\vec{k}}(\vec{r})$ - Кулоны үржигдэхүүн

$$\Phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = N_k F\left(-\frac{i}{k}, 1, -ikr - i\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \quad (20)$$

$$N_k = (2\pi)^{-3/2} \exp\left(\frac{\pi}{2k}\right) \Gamma\left(1 + \frac{i}{k}\right) \text{ нормчлолын}$$

коэффициент. Кулон – Волковын ойроцоололд иончлолын амплитуд:

$$a^{CV}(t) = -iN_k N_i \int_0^t dt \exp\left\{i(\varepsilon_f - \varepsilon_i)t + i \int_0^t dt' \vec{k} \cdot \vec{A}(t')\right\} \vec{E}(t) \cdot \int d^3r e^{-r\vec{r}} e^{i(\vec{k} + \vec{A}(t))\vec{r}} F\left(-\frac{i}{k}, 1, -ikr - i\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \quad (21)$$

$N_i = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$ эхний төлөвийн нормчлолын коэффициент. Матрицын элементэд орж буй координатын интеграл нь

$$\vec{I}_0(\vec{k}, t) = \int d^3r e^{i(\vec{k} + \vec{A}(t))\vec{r} - Zr} \vec{r} F\left(-\frac{i}{k}, 1, -ikr - i\vec{k} \cdot \vec{r}\right) \quad (22)$$

(22)-т дараах интегралыг ашиглавал: [18]

$$K_0 = \int d^3r \cdot \frac{1}{r} e^{i\vec{q}\vec{r} - i\lambda r} F(ia_1; 1; ip_1r - i\vec{p}_1\vec{r}) F(ia_2; 1; ip_2r - i\vec{p}_2\vec{r}) = \frac{2\pi}{\alpha} e^{-\pi a_1} \left(\frac{\alpha}{\gamma}\right)^{ia_1} \left(\frac{\alpha}{\alpha + \beta}\right)^{ia_2} F\left(ia_1; ia_2; 1; \frac{\beta\gamma - \alpha\delta}{\gamma(\alpha + \beta)}\right) \quad (23)$$

дээрх интеграл нь $a_1 = 0$ үед гарч ирнэ.

$$K_0 = \int d^3r \cdot \frac{1}{r} e^{i\vec{q}\vec{r} - i\lambda r} F(ia_2; 1; ip_2r - i\vec{p}_2\vec{r}) = \frac{2\pi}{\alpha} \left(\frac{\alpha}{\alpha + \beta}\right)^{ia_2} F\left(0; ia_2; 1; \frac{\beta\gamma - \alpha\delta}{\gamma(\alpha + \beta)}\right) \quad (24)$$

$$\text{Энд } \alpha = \frac{1}{2}(q^2 + \lambda^2), \quad \beta = \vec{p}_2\vec{q} - i\lambda p_2, \quad a_2 = \frac{i}{k}$$

$$K_0 = \frac{2\pi}{\alpha'} \left(\frac{\alpha'}{\alpha' + \beta}\right)^{ia_2} = \frac{2\pi}{\frac{1}{2}(q^2 + \lambda^2)} \cdot \left(\frac{\frac{1}{2}(q^2 + \lambda^2)}{\frac{1}{2}(q^2 + \lambda^2) + \vec{p}_2\vec{q} - i\lambda p_2}\right)^{ia_2} \quad (25)$$

(25)-ыг (22)- тай харьцуулбал:

$$\vec{I}_0(\vec{k}, t) = -\frac{\partial^2 K_0}{\partial \lambda \partial \vec{q}} \quad (26)$$

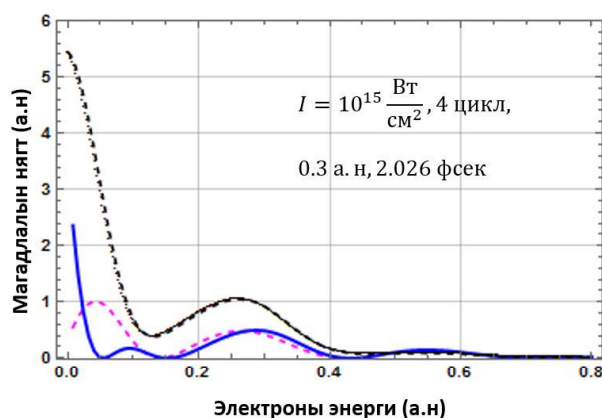
болно. Эдгээр уламжлалыг авч (21)-т орлуулахад Кулон-Волковын ойролцоололоор амплитуд:

иончлолын

$$a^{CV}(\vec{k}, t) = -\frac{32\pi(2i\vec{k}(i + \vec{k})^2 + 2(1 + i\vec{k})(i + \vec{k})\vec{A}(t) + (-4 + 2i\vec{k})\vec{A}(t)^2 - 2i\vec{A}(t)^3)}{(i + \vec{k} - \vec{A}(t))^2 (1 + \vec{k}^2 + 2\vec{k} \cdot \vec{A}(t) + \vec{A}(t)^2)} \quad (27)$$

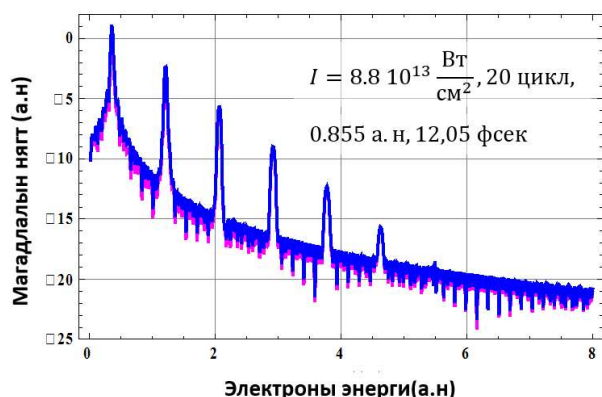
III. ҮР ДҮН

Атомыг $I = 10^{15}$ Вт/см² эрчимтэй, 4циклтэй, 0.3 а.н давтамжтай 2.026 фемтосекундын лазерын пульсээр иончлох процессыг Кулоны долгион функцээр бааз хийсэн дискрет хувьсагчаар илэрхийлэх аргаар хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг гурван хэмжээст Математика програмаар тооцоолоход дараах үр гарлаа. Үр дүнгээс харахад Дискрет хувьсагчийн арга нь маш сайн үр дүн өгсөн буюу [13] ажлын үр дүнтэй тохирч байна. Хүчтэй орны ба Кулон-Волковын ойролцоолол бага энергийн мужид зөрүүтэй гарсан. Дээрх гурван арга их энергийн мужид дөхөлт сайтай байна.



Зураг 1. Иончлолын магадлалын нягт электроны энергиэс хамаарах хамаарал (шулуун-ХХО, тасархай шугам-КВО, цэг-ДХА).

Мөн лазерын пульсын уртыг 6 дахин нэмэгдүүлсэн 12.05 фемтосекундын пульсээр устөрөгчийн атомын үндсэн төлөвийг иончлох магадлалын нягтыг хүчтэй орны ба Кулон-Волковын ойролцооллоор бодсон үр дүнгүүдийг харьцуулахад их энергитэй электрон сугаран гарах үед дээрх ойролцооллоуд тохирч байна.



Зураг 2. Иончлолын магадлалын нягт электроны энергиэс хамаарах (ХХО, КВО).

ХХО ба КВО аргуудаар тооцоолсон иончлолын магадлалын нягтыг тооцоолсон үр дүнгүүдийг харьцуулахад олон фотоны зэрэг шингээх магадлал нь жигд бууралттай байна.

IV. ДҮГНЭЛТ

Лазерын пульсээр атомыг иончлох бодлогод Кулоны долгион функцээр бааз хийсэн дискрет хувьсагчаар илэрхийлэх аргаар хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг гурван хэмжээст тохиолдолд бодлоо. Дискрет хувьсагчийн арга нь бусад аргуудтай харьцуулахад Шредингерийн тэгшитгэл бодох нарийчлал сайтай арга болох нь харагдлаа. Бидний тооцоо Alexei N. Grum-Grzhimailo [13] нарын матриц-итерацийн аргаар бодсон үр дүнтэй харьцуулахад тохирч байна. Хүчтэй орны ба Кулон-Волковын ойролцоо аргууд нь

их энергитэй мужид тооцоолол хийхэд тохиромжтой байна.

V. АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

- [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] Xiao-Min Tong, Shih-I Chu, Chemical physics 217 (1997), 119-130
- [4] L.A.Collins, A.L.Merts, J.Opt.Soc.Am. **B7**, 647 (1990).
- [5] Xiaoxin Zhou and C.D.Lin, Phys.Rev.Lett.**64**, 862 (1990).
- [6] Q.Su, J.H.Eberly and J.Javanainen, Phys. Rev. Lett. **64**, 862 (1990).
- [7] V.C.Reed, K.Burnett, Phys. Rev. A**42**, 3152 (1990).
- [8] J.H.Eberly, J.Javanainen and Q.Su, J. Opt. Soc. Am. **B6**, 1289 (1989).
- [9] B.I.Schneider, Phys. Rev. A, **55**, 3417 (1997).
- [10] M.Gavrila, J.Shertzer, Phys, Rev. A, **53**, 3431 (1996).
- [11] Jian Zhang, Lambropoulos, Phys. Rev. Lett., **77**, 2186 (1996).
- [12] Л.Д.Ландау, Е.М. Лифшиц, Физика III, Москва (1974).
- [13] Alexei N. Grum-Grzhimailo, Brant Abeln, Klaus Bartschat and Daniel Weflen, Phys. Rev. A., **81**, 043408 (2010).
- [14] Liang-You Peng, and Anthony F Starace, J. Chem. Phys., **125**, 154311(2006).
- [15] Liang-You Peng, and Anthony F. Starace, 2008. arXiv:physics/0604181v1/
- [16] Keldysh.L.V (1965) "Ionization in the field of a strong electromagnetic wave" Soviet physics JETP, volume20, Number1.
- [17] Jain M and Tzoar N (1978) Phys. Rev. A, **18**, 538-45.
- [18] Nordsieck.A, (1953) "Reduction of an Integral in the Theory of Bremsstrahlung" Physical review volume 93, number 4.