Цахилгаан статик орон дахь устөрөгчийн атомын туннелийн иончлол

Ч.Алдармаа*, Л.Хэнмэдэх, Г.Зоригт

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

Энэ ажилд устөрөгчийн атомыг цахилгаан статик орноор үйлчлэх процессын динамикийг судлан туннелийн ионлолын магадлалыг хугацаанаас хамааруулан тооцоолсон. Тооцоололд цахилгаан статик оронд устөрөгчийн электрон үндсэн төлвөөсөө хэрхэн хувьсалд орж байгааг долгион функцийн огторгуйн дискрет торын зангилаан дээрх утгуудаар нь илэрхийлэв. Кулон функцийн дискрет хувьсагчийн төлөөлөлийн аргаар ионлолын магадлал хугацааны хамаарал, энергийн спектр, өнцгийн түгэлт, моментын түгэлтийг тус гаргаж бусад онолын тооцооллын үр дүнтэй харьцууллаа.

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

ОРШИЛ

Бид цахилгаан статик орноор устөрөгчийн атомын ионлох процессыг дискрет хувьсагчийн төлөөлөлийн аргаар тооцоолсон. Дискрет хувьсагчийн төлөөлөлд псевдоспектр бааз байгуулан тооцоолол хийх арга 50 гаруй жилийн өмнөөс хөгжиж ирсэн бөгөөд лазер атомын харилцан үйлчлэл, цэнэгт бөөм атом, молекултай харилцан үйлчлэх процессийг судлахад ашиглаж байна. Дискрет хувьсагчийн төлөөлөлийн аргыг анх Harris нар 1965 онд [1] , Dickinson, Certain нар 1968 онд [2], Lill, Light нар 1982 онд [3], Light нар 1985 онд [4] олон судлаачид хөгжүүлж ирсэн байна. Дискрет хувьсагчийн төлөөлөлд ихэнхдээ ортогональ олон гишүүнт, эсвэл тригнометрийг функцүүдээр торын зангиануудын хувьд квадратурын дүрмийг ашиглан вариацын бүрэн баазыг тодорхойлсон байна. Кулоны функцийн дискрет хувьсагчийн ойролцоололд потенциал энергийн матриц нь диагональчлагдах ба диагоналын утга нь торын зангилаан дээрх потенциалын утгаар илэрхийлэгдэнэ. Кинетик энергийн матрицыг вариацын баазын төлөөлөлд илэрхийлээд дискрет хувьсагчийн төлөөлөлд хувиргана. Атомын физикт Кулоны потенциалыг илэрхийлэхэд хүндрэлтэй учраас тийм ч олон ажил гараагүй байна. Өргөтгөсөн Лагеррийн торонд суурилсан дискрет хувьсагчийн төлөөлөлийн аргаар (DVR) аргыг Baye ба Heenen нар 1986 онд [5] томъёолон гаргасан. Baye, Heenen нар энэ аргаар өргөтгөсөн Лагеррийн олон гишүүнтийн язгууруудаар тор үүсгэн олон төрлийн потенциал, Кулоны потенциалыг ойролцоолох устөрөгчийн холбоост төлвүүдийн энергийг тооцоолоход ашигласан. Цахилгаан статик оронд байгаа устөрөгчийн атомын нэг хэмжээст үед Rodney Loudon нар 1959 онд [6], Q.Su, J.H. Eberly нар 1991онд [7] хувийн утгын бодлого, A.N. Gordeye, S.C.Chhajlany нар 1997 онд [8] Лапласын трансформ ойролцооллын аргаар, A.M. Ishkhanyan, V.P Krainov нар 2019 онд [9] Whittaker (WKB) ойролцооллын аргаар тооцоолж холбоост төлөвүүдийн энерги ба долгион функцүүдийг тооцоолсон. Гурван хэмжээст үед Sydney Geltman нар 2000 онд [10] хүчтэй холбоосын аргаар, Ph.Durand, I.Paidarova 2003 онд [11] Гриний функц ашиглан тооцоолж ионлолын магадлал хугацаанаас хамаарах хамаарлыг цахилгаан орны хэмжээнээс хамааруулан тооцоолж байна. Энэхүү өгүүлэлд томъёолол ба үр дүнд атом нэгжийн системийг ашигласан болно.

ОНОЛ

Устөрөгчийн атомыг цахилгаан статик орноор үйлчлэх процессыг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг бодох замаар гүйцэтгэв. Электроны төлвийн өөрчлөлтийн динамикийг ашиглан ионлолын магадлалыг тооцооллоо. Гадны оронд байгаа устөрөгчийн атомын электроны хувьд Шредингерийн тэгшитгэлийг бичвэл [12]

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

* Electronic address: aldarmaa@must.edu.mn

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

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

Шредингерийн тэгшитгэлээс хугацааны t эгшинээс $t+\Delta t$ эгшин дэх долгион функцийг олбол [13]:

$$\psi(r,t+\Delta t) = e^{-i(\widehat{H}_0+\widehat{V}(\vec{r},t))\Delta t}\,\psi(\vec{r},t) \quad (3)$$

Энэхүү итерацийн алхмуудаар долгион функцийн 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 хамааралгүй операторуудыг салган, бөмбөлөг координатын системд долгион функцийг тодорхойлбол [13]:

$$\psi(r,\theta,\varphi,t+\Delta t) \cong \exp\left(-i\widehat{V}(r,\theta,\varphi,t+\Delta t)\frac{\Delta t}{2}\right)\times exp\left(i\widehat{H}_0\Delta t\right)\times exp\left(-i\widehat{V}(r,\theta,\varphi,t)\frac{\Delta t}{2}\right)\psi(r,\theta,\varphi,t) \quad (4)$$

Дээрх хугацааны итерацын алхамд гадны орны харилцан үйлчлэл ба атомын гамильтонианыг үйлчлэлийг ээлжлэн тооцоолж байна. Долгион функцийг бөмбөлөг координатын системд сфер гармоник функцээр задлан бичвэл:

$$\psi\left(r_i,\theta_j,\varphi_k,t\right) = \sum_{l=0}^{lmax}\sum_{m=-l}^{l} R_{l,m}\left(r_i,t\right)Y_{l,m}\left(\varphi_k,\theta_j\right) \quad (5)$$

$Y_{l,m}\left(\varphi_k,\theta_j\right)$ сфер гармоник, $R(r_i,t)$ радиал функц. Энд радиал функц нь хугацаанаас хамааран тодорхойлогдоно. Дээрх долгион функцыг (1) тэгшитгэлд орлуулбал өнцгийн ба радиал тэгшитгэлүүд болгон задалж болно. Өнцгийн тэгшитгэлийн хувьд $\widehat{L}^2$ операторын хувийн функцүүд нь $Y_{l,m}(\varphi,\vartheta)$ сфер гармоник ба хувийн утгууд нь $l(l+1)$ болно [14]. Радиал тэгшитгэл нь хугацаанаас хамаарах радиал функцийг тодорхойлно. Долгион функцийн сфер функцээр задалсан задаргааны коэффициент (5) болох радиал функцийг өнцгийн интегралаар тооцоолон гаргах ба энд интегралыг квадратур ашиглан бичвэл:

$$R_{l,m}(r_i,t) = \sum_{k=1}^{kmax}\sum_{j=1}^{jmax}\psi\left(r_i,\theta_j,\varphi_k,t\right)Y_{l,m}^{*}\left(\varphi_k,\theta_j\right)w_k\,w_j \quad (6)$$

$w_k,\,w_j$ эдгээр нь Симпсоны ба Гаусс-Лежандрын жингүүд $jmax$ θ өнцгийн зангилааны тоо, $kmax$ φ өнцгийн зангилааны тоо болно. Кулоны функцыг $F(r)$ түүний уламжлалыг $F'(r)$ гээд $\frac{R_{l,m}(r_i,t)}{F'(r)} = \phi_{k,j}$ гэвэл атомын гамильтаниотай стационар тэгшитгэлээс дараах шугаман тэгшитгэлийн системийг гаргаж болно [15].

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

$$i = 1...N \quad (7)$$

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

$$D_{i,j} = \frac{1}{3}\left(E+\frac{Z1}{r_i}\right)\delta_{i,j} + \left(1-\delta_{i,j}\right)\frac{1}{(r_i-r_i)^2} \quad (8)$$

E электроны энерги, $Z1$ кулоны функцийн цэнэг, $V_l(r_j)$координатаас хамаарсан потенциал.

$V_l\left(r_j\right) = \frac{l(l+1)}{2r_j^2} - \frac{1}{r_j}$, l - орбитын квант тоо. (7) 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 псевдоспектрүүд болох ба бүрэн бааз үүсгэнэ. Хугацаанаас хамаарсан долгион функцийн радиал функцийг координатын төлөөллөөс энэхүү псевдоспектрал бааз дээр задлах буюу энергийн төлөөлөлд шилжүүлээд $\widehat{H}_0$ 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 $\widehat{H}_0$ операторын үйлчлэлийг тооцоолохдоо долгион функцээс (6) илэрхийллээр радиал функцийн утгуудыг тодорхойлон (9) илэрхийлэлээр гүйцэтгэх ба энд $S_{ij}(l)$ хувийн утгуудаар тодорхойлогдох хувьсалын матриц болно.

$$[\exp(-iH_l^0\Delta t)\,R_{l,m}(r_j,t)]_i = \sum_{j=1}^{N} S_{ij}(l)R_{l,m}(r_j,t), \quad (9)$$

Хувьсалын матриц нь:

$$S_{ij}(l) = \sum_k \phi_{k,j}\,(l)\phi_{k,i}(l)\exp(-i\varepsilon_k(l)\,\Delta t) \quad (10)$$

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

ҮР ДҮН

Устөрөгчийн атомыг цахилгаан статик орноор үйлчлэх процессыг 1D ба 3D хэмжээст үед тооцоолон электроны төлвийн өөрчлөлтийн динамикийг судлан иончлолын магадлалыг тооцоолсон билээ.

A. Нэг хэмжээст Кулоны потенциал

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{\sqrt{1+x^2}}\right]\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x)$$

N	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5
32	-0.564586	-0.319294	-0.130891	-0.101911	-0.056388
64	-0.660567	-0.278808	-0.149597	-0.093656	-0.062592
128	-0.669731	-0.274908	-0.151446	-0.092674	-0.063175
256	-0.669977	-0.274891	-0.151455	-0.092670	-0.063178
FD	-0.669856	-0.274978	-0.151515	-0.092708	-0.063204
Ref [7]	-0.669818	-0.274937	-0.151486	-0.092699	-0.063539

B. Диполийн матрицын элемент

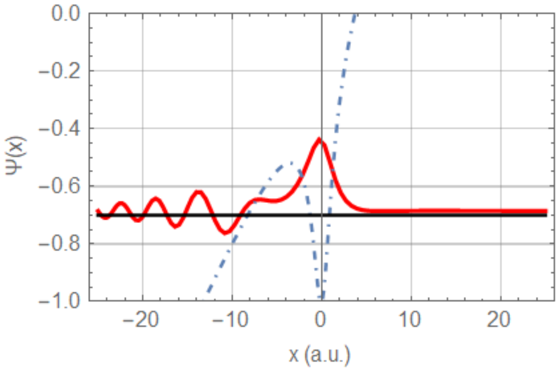
$$x_{kn} = \langle k|x|n\rangle = \int dx\ \Psi_k^*(x)\,x\,\Psi_n(x)$$

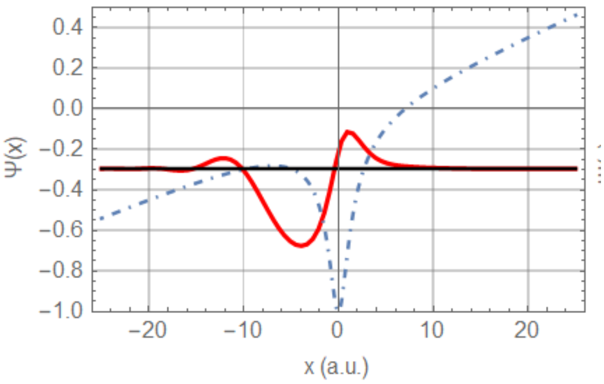
N	x_1	x_{12}	x_{14}	x_{23}	x_{25}
32	0	0.789548	-0.140933	2.565172	0.216795
64	0	1.026825	0.177563	2.526002	-0.387776
128	0	1.048363	-0.192922	2.602971	-0.430297
256	0	1.047098	-0.192048	2.598478	-0.427863
FD	0	1.047930	-0.192725	2.602116	-0.429594
Ref [7]	0	1.047806	-0.192732	2.602690	-0.422240

C. Туннелын иончлол

$$\left[-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} + Fx\right]\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x)$$

Цахилгаан статик орон хүчтэй болоход саадын өндөр багасаж электрон сугаран гарах магадлал ихэснэ.

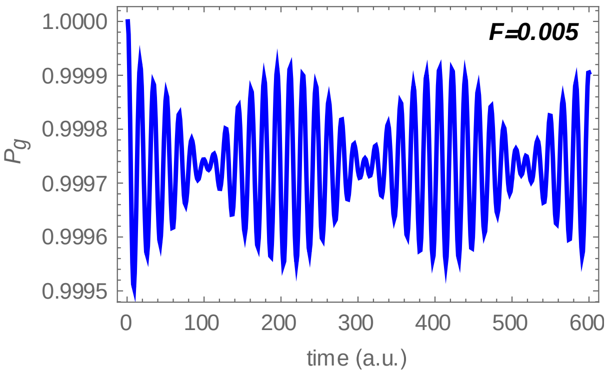


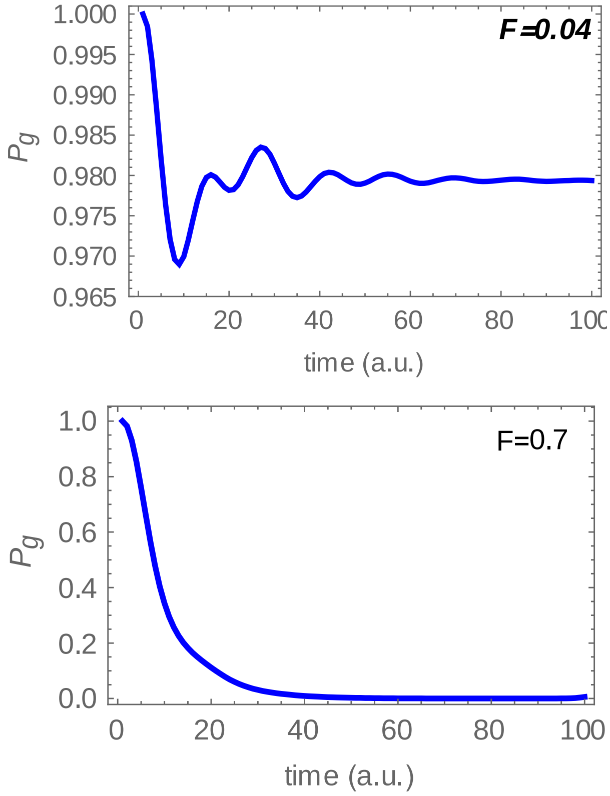


Зураг 1. Туннелээр нэвтрэн гарах долгион (A). $n = 1$ *төлөвөөр* $F = 0.07\,a.u$, $E_1 = -0.685419 a.u$ *(B)* $n = 2$ *төлөвөөр* $F = 0.02\ a.u$, $E_1 = -0.295937 a.u$

D. Үндсэн төлөвтөө үлдэх иончлолын магадлал хугацааны хамаарал (3D)

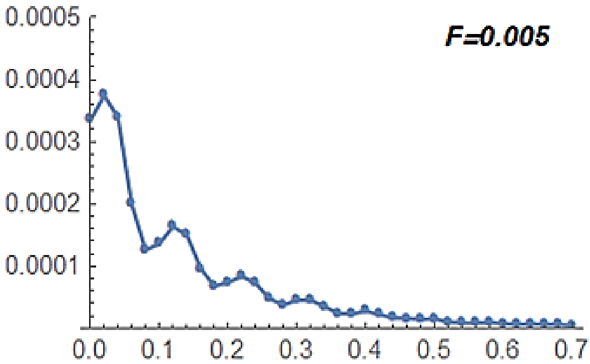
Тооцоололд Кулоны долгион функцын цэнэгийг 120, долгион тоог 4а.н утгатай авч, радиал зангилааны тоог 20 -гаар сонгон авахад радиусын максимум $r_{max} = 153.95$а.н зайд тооцоололыг хийлээ.

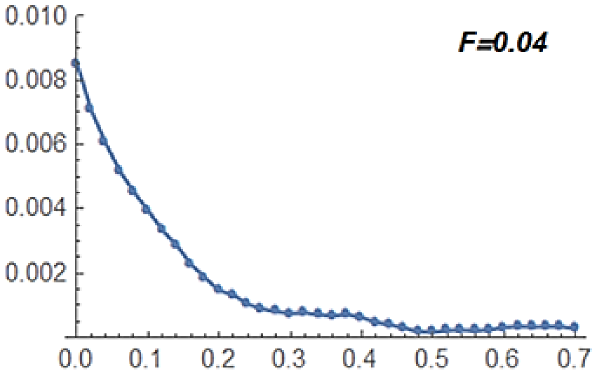


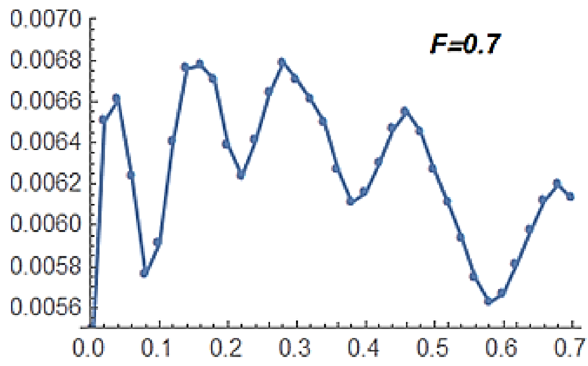


Зураг 2. Үндсэн төлөвтөө үлдэх ионхлолын магадлал хамаарах хамаарал. (Цахилгаан орны хэмжээ F=0.005, F=0.04, F=0.7).

Ионхлолын магадлал энергиэс хамаарах хамааралыг дүрслэвэл:

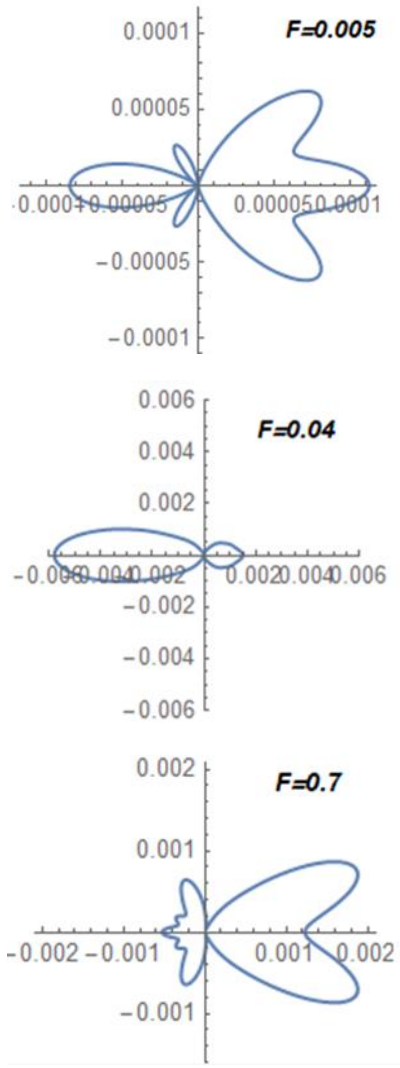






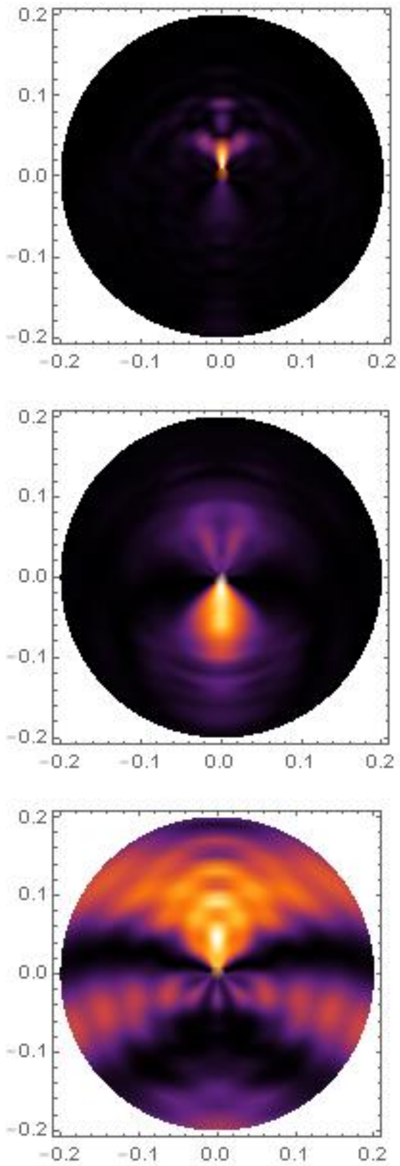
Зураг 3. Ионхлол магадлалын энергиэс хамаарах хамаарал.

Туйлшралын хавтгай дээрх сугарсан электроны өнцгийн түгэлтийг цахилгаан орныг тогтмол байлгаж электроны кинетик энергийг өөрчлөх замаар судлав.



Зураг 4. Өнцгийн түгэлт.

Ионхлолын дүнд сугарч гарсан электроны өнцгийн түгэлт нь эцсийн төлөвийн энергиэс хамаарна. Өнцгийн ба энергийн түгэлтийг нэгтгэн импульсийн түгэлтийг тооцоолсон.



Зураг 5. Импульсын түгэлт.

ДҮГНЭЛТ

Устөрөгчийн цахилгаан статик орноор атомын иончлох процессыг Кулоны функцийн дискрет хувьсагчийн аргаар тооцооллоо. Кулон функцын дискрет хувьсагчийн аргаар иончлолын магадлал хугацааны хамаарал, энергийн спектр, өнцгийн түгэлт, моментын түгэлтийг тус гаргаж бусад онолын тооцооллын үр дүнтэй харьцууллаа. Цахилгаан орны хэмжээ нэмэгдэх тусам, олон фотоны шингээлтийн пикийн өндөр ихсэж, иончлолын магадлал өсөж байгааг тодорууллаа. Иончлолын энергиэс бага энергитэй фотон тусгахад туннелын иончлол үзэгдэл ажиглагдаж байна.

АШИГЛАСАН МАТЕРИАЛ

[1] D. O. Harris, G. G. Engerholm, and W. D. Gwinn, J. Chem. Phys. 43, 151 (1965).

[2] *Dickinson* and *Certain* Lebedev discrete variable representation (*DVR*) (J. Chem. Phys. 49 4209, *1968*

[3] Lill.J.V, Parker G.A, Light.J.C Discrete variable representations and sudden models in quantum scattering theory, Chemical Physics Letters, Volume 89, Issue 6, p. 483-489.1982

[4] J. C. Light, I. P. Hamilton, *and* J. V. Lill Light Generalized discrete variable approximation in quantum mechanics, J. Chem. Phys. **82**, 1400 (1985)

[5] Baye D and Heenen Generalised meshes for quantum mechanical problems, 1986 J.Phys A.Math Gen 19 2041

[6] Loudon R. 1959 One dimensional hydrogen atom, Am. J.Phys 27, 649-655 (doi:10.119/1.1934950)

[7] Q.Su, J.H. Eberly Model atom for multiphoton physics, Phys Rev A ,Vol 44, (9) 1991

[8] A.N. Gordeye, S.C.Chhajlany One-dimensional hydrogen atom: a singular potential in quantum mechanics J.Phys.A.Math.Gen. 30 (1997) 6893-6909

[9] A.M. Ishkhanyan, V.P Krainov WKB-approach for the 1D hydrogen, Results in Physics 12 (2019) 1490-1491

[10] Sydney Geltman Short-time dynamics of static field excitation and ionization J.Phys, B: At.Mol.Opt. Phys 33(2000) 4769-4777

[11] Ph.Durand, I.Paidarova Ionization of the hydrogen atom: from weak to strong static electric fields, Eur.Phys.J. D 26, 253-259 (2003)

[12] Landau LD, Lifshitz EM 1977 Quantum mechanics. Oxford, UK, Pergamon Press

[13] D. A. Telnov and S. I. Chu, "Theoretical study of the energy spectra of multiphoton above-threshold dissociation of H_2^+ in intense laser fields", *Chem. Phys. Lett.* **255**, 223–231 (1996)

[14] Peng, Liang-You and Starace, Anthony F., " of Coulomb wave function DVR: Application to atomic systems in strong laser fields, 2008. arXiv:physics/0604181v1/

[15] Xiao- Min, Shih I Chu “Theoretical study of multiple high-order harmonic generation by intense ultrashort pulsed laser fields: A new

generalized pseudospectral time dependent method ” Chemical Physics 217 (1997) 119-130

[16] Peng, Liang-You and Starace, Anthony F., Application of Coulomb wave function discrete variable representation to atomic systems in strong laser fields, 2006. Anthony F. Starace Publications. Paper 99.