

# Атомыг Лазерын Пульсээр Өдөөх Магадлалыг Псевдоспектриал Аргаар Тооцоолох

Ч. Алдармаа<sup>1\*</sup>, Л. Хэнмэдэх<sup>1</sup>, Г. Зоригт<sup>1</sup>, О. Лхагва<sup>2</sup>

<sup>1</sup>ШУТИС, ХШУС, Физикийн тэнхим

<sup>2</sup>МУИС, ШУС, Физикийн тэнхим

Энэхүү ажилд нанометр урттай лазерын богино пульс, атомын харилцан үйлчлэлийг судлаж хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлж, Лежандрин псевдоспектриал аргаар шийдсэн. Үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атом ба гелийн ионтой хүчтэй лазерын пульсын үйлчлэлээр тодорхой төлөвүүдэд өдөөгдөх магадлалын хугацааны хамааралыг тооцоолж, бусад ажлуудын үр дүнтэй харьцуулан дүн шинжилгээ хийлээ. Өдөөлтийн магадлал нь пульсын урт болон лазерын эрчмээс хамаарах бөгөөд лазерын эрчим өсөхөд магадлал ихсэж, эхний төлөвт үлдэх магадлал багасаж байгаа нь ажиглагдсан. Хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийг шийдэж эдгээр гаргасан үр дүн нь MADNESS програмын мультивэйвлет баазар [14] бодсон үр дүнтэй тохирч байна.

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

## I. ОРШИЛ

Атом, молекулд явах үзэгдэл хувирал нь  $10^{-15} - 10^{-18}c$  эрэмбэтэй буюу асар богино хугацаанд үргэлжилдэг. Иймд атомын өдөөлт, иончлол, болон химийн урвалын өрнөл хувирлын процессын шинж чанарыг лазерын богино пульсээр тандан судлах нь атом молекулын судалгааны шинэ чиглэлийг тодорхойлж байна [1,2]. Лазерын хүчтэй пульс нь атомын бүтцийг хөндсөнөөр шугаман бус үйл явц өрнөж, урьд өмнө ажиглах боломжгүй байсан олон фотонор атомыг өдөөх ба иончлох үзэгдэл, өндөр давтамжтай фотоныг үүсгэх үзэгдэл зэрэг онолын болон туршилтын судалгааны шинэ боломжийг ч нээж байгаа юм.

Лазерын пульсийн уртыг хэдхэн аттосекундын хэмжээнд хүртэл богиносгож чадвал молекул төдийгүй, атом дотор явагдах процессын дөрвөн хэмжээст дүрслэлийг гарган авах боломжтой болох юм. 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 суурь функцаар задлах аргаар бодож байна. Бааз функцыг сонгохдоо атомын хувийн долгион функц эсвэл Волковын [3] функц болон бусад [4,5] функцыг ашиглан хугацаанаас хамаарсан хоёрдугаар эрэмбийн дифференциал тэгшитгэл гарган авч, уг систем тэгшитгэлийн шийдийг тооцооллын аргаар тодорхойлж байна. Торын аргаар бодохдоо төгсгөлөг ялгавар [6,7] тоон базис [8], төгсгөлөг элемент [9], В сплайн [10] ашиглан тооцоог хийсэн байна. Эдгээрээс хөндөх онол, хүчтэй орны болон Кулон – Волковын ойролцооллыг түлхүү хэрэглэдэг.

Цөмийн Кулоны орны үйлчлэл нь лазерын орны үйлчлэлээс бага үед өөрөөр хэлбэл лазерын орон нэн эрчимтэй байхад хүчтэй орны ойролцооллыг хэрэглэх боломжтой. Лазерын орон дахь электроны хөдөлгөөнд цөмийн Кулоны орны үзүүлэх нөлөөг Кулон-Волковын функц ашиглан тооцоолж болно. Энэхүү ажилд лазерын богино пульсээр, устөрөгчийн атом ба гелийн ионы өдөөгдөх ба иончлох процессыг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлж, уг тэгшитгэлээ Лежандрин псевдоспектриал аргаар шийдсэн.

## II. ПСЕВДОСПЕКТРИАЛ АРГА

Лазерын оронд байгаа атомын электроны хувьд Шредингерийн тэгшитгэлийг бичвэл [11]

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

$\Psi(\vec{r}, t)$ -атомын электроны долгион функц,  $\hat{H}_0$ - атомын гамилтанион,  $\hat{V}(\vec{r}, t)$ -лазер атомын харилцан үйлчлэл. Хүчтэй лазерын оронд лазер-атомын харилцан үйлчлэлийг диполийн ойролцооллод уртын тохируулгаар сонгон авбал [12]:

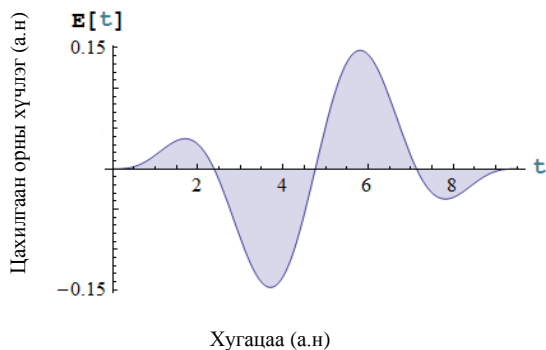
$$\hat{V}(\vec{r}, t) = -\vec{r} \cdot \vec{E}(t) \quad (2)$$

Лазерын цахилгаан орныг синус квадрат хүрээтэйгээр сонгон авлаа [14].

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

$E_0$ -лазерын цахилгаан орны далайц,  $\tau$ -пульсийн үргэлжлэх хугацаа,  $\omega$ -давтамж, хугацааны  $t$  эгшинд долгион функц мэдэгдэж байгаа тохиолдолд  $t + \Delta t$  эгшин дэх долгион функцийг олбол [13]:

\*Electronic address: [aldaraa2004@yahoo.com](mailto:aldaraa2004@yahoo.com)



Зураг 1: Лазерын цахилгаан орны хугацааны хамаарал ( $\tau = 9.6 \text{ а.н} = 230 \text{ а.с}$ )

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

Энд хугацааг хуваах аргаар хугацаанаас хамаарсан ба хамаараагүй операторуудыг салган Странкийн аргаар долгион функцыг тодорхойлбол:

$$\begin{aligned} \Psi(r, t + \Delta t) \equiv & \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0\Delta t}{2}\right) \\ & \times \exp\left(-\frac{i\hat{V}(r, \theta, t + \Delta t/2)\Delta t}{2}\right) \\ & \times \exp\left(-\frac{i\hat{H}_0\Delta t}{2}\right) \Psi(r, t). \end{aligned} \quad (5)$$

Долгион функцыг Лежандрын олон гишүүнтийн нийлбэр байдлаар илэрхийлбэл:

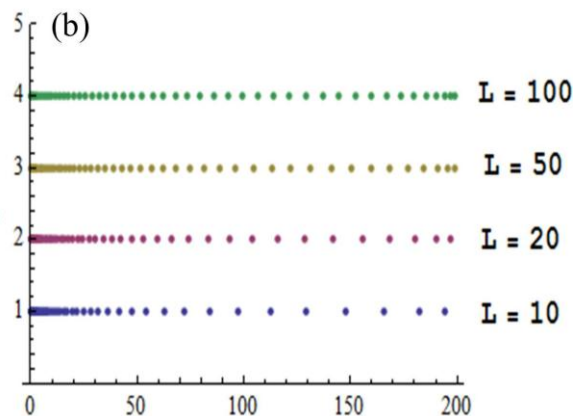
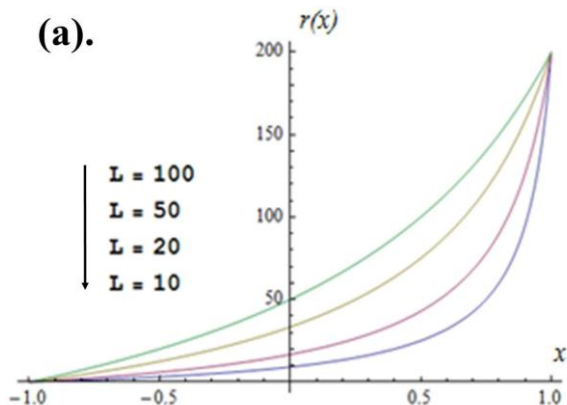
$$\Psi(r_i, \theta_j, t) = \sum_{l=0}^{l_{\max}} g_l(r_i) P_l(\cos \theta_j). \quad (6)$$

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

$$g_l(r_i) = \sum_{k=1}^{L+1} w_k P_l(\cos \theta_k) \Psi(r_i, \theta_k, t) \quad (7)$$

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

$$r = r(x) = L \frac{1+x}{1-x+a} \quad a = \frac{2L}{r_{\max}} \quad (8)$$



Зураг 2: Шугаман бус хувиргалтын функц (а). Функцын хотойлт (б). Зангилаа цэгүүд

Шугаман бус хувиргалтын функцын графикаас үзэхэд (Зураг 2А)  $L$ -ийг ихэсгэхэд  $r$ -ийн их утга руу зангилаа цэгүүд нягтарч байна.  $x_i$  зангилааны утгуудад харгалзах  $r_i(x_i)$  утгууд нь  $L$ -ээс хамааран хэрхэн тархаж байгааг (Зураг 2В)-д харуулав. Шугаман бус хувиргалт нь  $r$ -ийн бага утгуудад олон зангилаа цэг авах боломжийг олгодог. Бөмбөлөг координатын системд атомын гамилтанионыг бичвэл:

$$\hat{H}_l^0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} + \frac{1}{2} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (9)$$

$r$ -ээс  $x$  хувьсагчид шилжвэл:

$$\hat{H}_l^0 = -\frac{1}{2} \frac{1}{r'(x)} \frac{d^2}{dx^2} \frac{1}{r'(x)} + V_l(r(x)), \quad (10)$$

$$V_l(r(x)) = -\frac{1}{r(x)} + \frac{l(l+1)}{2r(x)^2}. \quad (11)$$

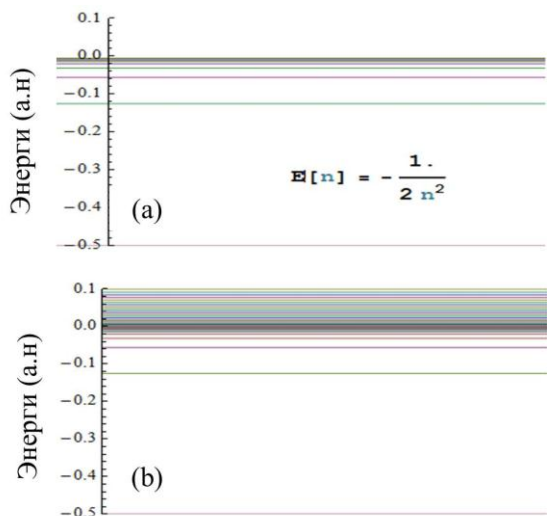
Лежандрын олон гишүүнтийн уламжлалын язгууруудыг олж  $x$  координатыг дискретчилвэл  $H_l^0$ -нь матриц хэлбэрт шилжинэ. Лежандрын псевдоспектриал арга нь  $x$  координатыг дискретчилж, Лежандрын олон гишүүнтийн  $x$ -ээр авсан уламжлал болон интегралыг -ашиглан тодорхойлоход оршино. Атомын Шредингерийн тэгшитгэлийн шийдийг  $-1 < x < 1$  мужид Гаусс-Лежандр-Лобаттогийн квадратурын зангилаа цэгүүд дээр тодорхойлж болно. Үүний тулд эдгээр зангилаа цэгүүдийг  $P_{N+1}$  буюу Лежандрын  $N+1$  эрэмбийн олон гишүүнтийн уламжлалын язгууруудаар бодож олно. Ингэснээр атомын гамилтанионы  $H_l^0$  нь дараах матриц хэлбэрт шилжинэ [13].

$$\left[ H_l^0 \right]_{ij} = (D_2)_{ij} + V_l(x_i) \delta_{ij} \quad (12)$$

$$(D_2)_{ij} = \frac{1}{r'(x_i)} \frac{(N+1)(N+2)}{6(1-x_i^2)} \frac{1}{r'(x_i)}, \quad i = j$$

$$(D_2)_{ij} = \frac{1}{r'(x_i)} \frac{1}{(x_i - x_j)^2} \frac{1}{r'(x_j)}, \quad i \neq j \quad (13)$$

$H_0$  матрицын хувийн утга  $E_k(l)$  псевдоспектр болон хувийн векторыг  $X_k(l)$  Математика7.0 програмаар тооцоолов. Тодорхойлогдсон хувийн утгууд нь атомын спектртэй харьцуулахад шууд давхцахгүй боловч ойролцоо спектрийг псевдоспектр үзүүлдэг. Үүнд холбоост төлөвөөс гадна тасралтгүй төлөвүүд ч бас дискрет спектртэй байна.

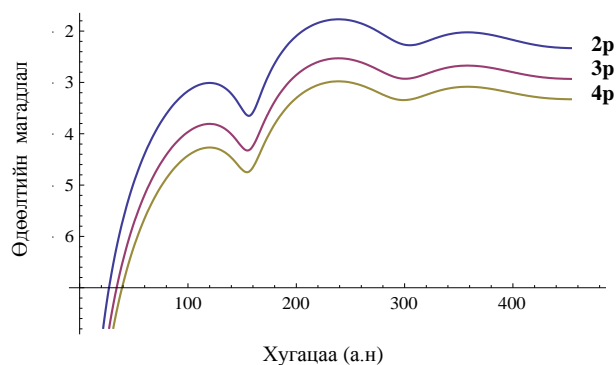


Зураг 3: Устөрөгчийн атомын спектр ба Псевдоспектр (a). Атомын спектр (b). Псевдоспектр

Энэ нь хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийн шийдийг хялбар илэрхийлэх боломжийг олгодог. Эдгээр спектрүүдийн хувийн векторууд нь бүрэн бааз болох учир хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийн долгион функцыг энэхүү бааз дээр задлан, хугацааг хуваах аргаар (5) тэгшитгэлийн шийдийг тооцоолно. Энэхүү ажилд атом нэгжийн системийг ашигласан.

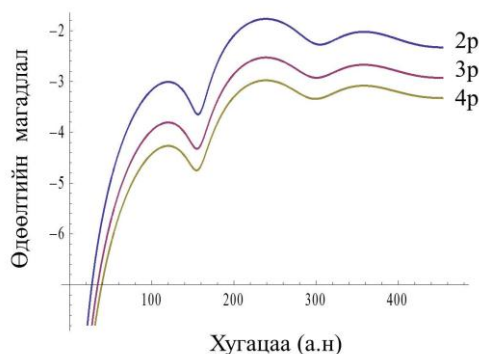
### Ш. ТООЦООЛОЛ БА ХАРЬЦУУЛАЛТ

Үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атом ба гелийн ионтой хүчтэй лазерын пульс харилцан үйлчлэхэд атом ба ионы тодорхой төлөвүүдэд өдөөгдөх магадлалын хугацааны хамаарлыг тооцоолж бусад ажлуудтай үр дүнтэй харьцууллаа. Үндсэн төлөвтөө байгаа устөрөгчийн атом дээр үндсэн төлөвт 230a.c урттай  $10^{15}$  Вт/см<sup>2</sup> эрчимтэй лазерын пульс тусгавал 2s, 3s, 4s төлөвт өдөөгдөх магадлал  $10^{-6}$ - $10^{-4}$  эрэмбэтэй байна.

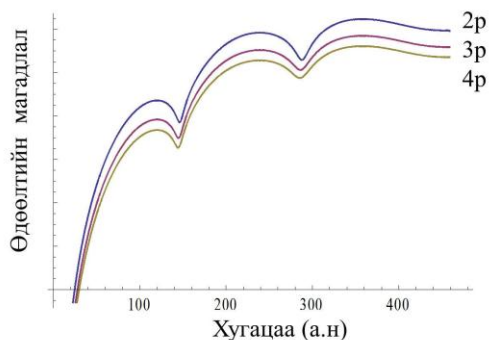


Зураг 4: Устөрөгчийн атомын үндсэн төлөвөөс өдөөгдөх магадлал хугацааны хамаарал(S-S төлөв)

2p, 3p, 4p төлөвт өдөөгдөх магадлал нь  $10^{-4}$ - $10^{-2}$  эрэмбэтэй бөгөөд үндсэн төлөвөөс өдөөгдөх учир s,d төлөвүүдэд өдөөгдөх магадлал бага байна



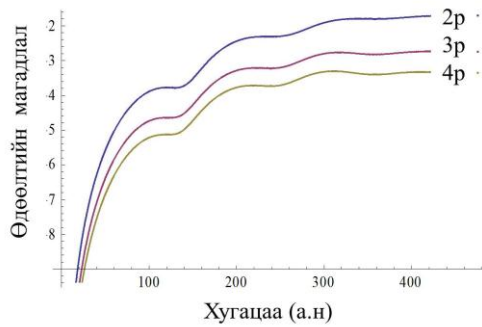
Зураг 5: Устөрөгчийн атомын үндсэн төлөвөөс өдөөгдөх магадлал хугацааны хамаарал (S-P төлөв)



Зураг 6: Гелийн ионы үндсэн төлөвөөс өдөөгдөх магадлал хугацааны хамаарал( S-S төлөв)

Гелийн ионы үндсэн төлөвөөс 2s, 3s, 4s төлөвт өдөөгдөх магадлал нь  $10^{-6}$ - $10^{-4}$  эрэмбэтэй байна. Мөн гелийн ионы үндсэн төлөвөөс 2p, 3p, 4p төлөвт өдөөгдөх магадлал  $10^{-4}$ - $10^{-2}$  эрэмбэтэй. Устөрөгчийн атом ба гелийн ионы үндсэн төлөвөөс өдөөгдөх магадлалын тооцоолсон үр дүнг Nicolas Vence, Robert Harrison [14] нарын MADNESS загварчлалаар

тооцоолсон үр дүнтэй харьцуулж 1-р хүснэгтэд харууллаа.



Зураг 7: Гелийн ионы үндсэн төлөвөөс өдөөгдөх магадлал хугацааны хамаарал (S-P төлөв)

#### IV. ДҮГНЭЛТ

Энэ судалгааны ажилд үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атом ба гелийн ионыг хүчтэй

Хүснэгт 1: Өдөөлтийн магадлал (H, He)

	1s	2s	2p	3d	4f	5g	$P_{\text{bound}}$	$P_{\text{ion}}$	
H	0.976	$2.09 \times 10^{-5}$	$5.03 \times 10^{-3}$	$1.17 \times 10^{-6}$	$2.4 \times 10^{-7}$	$10^{-13}$	0.0076	0.016	[14]
<b>H</b>	<b>0.978</b>	<b><math>1.78 \times 10^{-5}</math></b>	<b><math>4.63 \times 10^{-3}</math></b>	<b><math>0.98 \times 10^{-6}</math></b>	<b><math>5.74 \times 10^{-11}</math></b>	<b><math>1.11 \times 10^{-15}</math></b>	<b>0.006998</b>	<b>0.01469</b>	Бидний тооцоо
He <sup>+</sup>	0.975	$1.00 \times 10^{-4}$	$2.14 \times 10^{-2}$	$6.72 \times 10^{-5}$	$2.1 \times 10^{-8}$	$10^{-12}$	0.025	$8.5 \times 10^{-4}$	[14]
<b>He<sup>+</sup></b>	<b>0.976</b>	<b><math>0.84 \times 10^{-4}</math></b>	<b><math>1.96 \times 10^{-2}</math></b>	<b><math>5.67 \times 10^{-5}</math></b>	<b><math>1.71 \times 10^{-8}</math></b>	<b><math>2.26 \times 10^{-12}</math></b>	<b>0.0225</b>	<b><math>7.3 \times 10^{-4}</math></b>	Бидний тооцоо

лазерын пульс үйлчлэхэд тэдгээрийг өдөөгдсөн төлөвүүдэд шилжих магадлалын хугацааны хамааралыг тооцоолж бусад ажлуудын үр дүнтэй харьцуулан дүн шинжилгээ хийсэн. Өдөөлтийн магадлал нь пульсын урт болон лазерын эрчимээс хамаарах бөгөөд лазерын эрчим өсөхөд магадлал ихсэж, эхний төлөвт үлдэх магадлал багасаж ажиглагдлаа. Хүчтэй орны ойролцоолол, олон сувгийн хүчтэй холбоосын арга, Кулон-Волковын ойролцооллуудтай [15-17] харьцуулахад бодолтын нарийвчлал сайжирч гаргасан үр дүн нь MADNESS (Multiresolution ADaptive Numerical Environment for Scientific Simulation) мультивэйвлет баазаар [14] бодсон үр дүнтэй тохирч байна (Хүснэгт 1.1). Цаашид бодолтын нарийвчлалыг сайжруулан атомын иончлолыг тооцоолох зорилт тавьж байна.

- |   |  |
|---|--|
| <p>[1] J. L. Hansen, L. Holmegaard, J.H.Nielsen, H. Stapelfeldt, and L. B. Madsen, <i>J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.</i> <b>45</b>, 015101 (2012).</p> <p>[2] C. D. Lin, T. Morishita, R. Lucchese, and A. T. Le, Z. Chen, <i>J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.</i> <b>43</b>, 122001 (2010).</p> <p>[3] L. A. Collins, and A. L. Merts, <i>J. Opt. Soc. Am.</i> <b>B 7</b>, 647 (1990).</p> <p>[4] Xiaoxin Zhou, and C.D.Lin, <i>Phys. Rev. Lett.</i> <b>64</b>, 862 (1990).</p> <p>[5] Q. Su, J. H. Eberly, and J. Javanainen, <i>Phys. Rev. Lett.</i> <b>64</b>, 862 (1990).</p> <p>[6] V. C. Reed, K. Burnett, <i>Phys. Rev. A</i> <b>42</b>, 3152 (1990).</p> <p>[7] J. H. Eberly, J. Javanainen and Q. Su, <i>J. Opt. Soc. Am.</i> <b>B 6</b>, 1289 (1989).</p> <p>[8] B. I. Schneider, <i>Phys. Rev. A</i> <b>55</b>, 3417 (1997).</p> <p>[9] M. Gavril, and J. Shertzer, <i>Phys. Rev. A</i> <b>53</b>, 3431 (1996).</p> <p>[10] Jian Zhang, and Lambropoulos, <i>Phys. Rev. Lett.</i> <b>77</b>, 2186 (1996).</p> | <p>[11] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, <i>Физика III</i>, Москва (1974).</p> <p>[12] Frank Grossman, “Theoretical Femtosecond Physics” (2008).</p> <p>[13] Xiao-Min, Tong Shih IChu, <i>Chem. Phys.</i> <b>217</b>, 119 (1997).</p> <p>[14] Nicolas Vence, Robert Harrison <i>Phys. Rev. A</i> <b>85</b>, 033403 (2012).</p> <p>[15] Ч. Алдармаа, Л. Хэнмэдэх, О. Лхагва, МУИС, ФИЗИК сэтгүүл <b>397</b>(18), 96 (2013).</p> <p>[16] R. Guichard, H. Bachau, E. Cormier, R. Gayet and V. D. Rodriguez, <i>Phys. Scr.</i> <b>76</b>, 397 (2007).</p> <p>[17] Ch. Aldarmaa, L. Khenmedekh, O. Lkhagva, <i>American Institute of Physics (AIP) Proceedings</i>, <b>1589</b>. 239 (2014).</p> |
|---|--|