

Атомыг Хүчтэй Лазерын Пульсээр Иончлох Магадлалыг Дискрет Хувьсагчийн Аргаар Тооцоолох

Ч. Алдармаа^{1*}, Л. Хэнмэдэх¹, Г. Зоригт¹, О. Лхагва²

¹Шинжлэх Ухаан Технологийн Их Сургууль, Хэрэглээний Шинжлэх Ухааны Сургууль, Физикийн тэнхим

²Монгол Улсын Их Сургууль, Шинжлэх Ухааны Сургууль, Байгалийн Ухааны Салбар, Физикийн тэнхим

Энэхүү ажилд нанометр урттай лазерын богино пульс, атомын харилцан үйлчлэлийг судлаж хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлж, Кулоны дискрет хувьсагчийн аргаар шийдсэн. Үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атом хүчтэй лазерын пульсийн үйлчлэлээр иончлох магадлалын хугацааны хамааралыг тооцоолж, дүн шинжилгээ хийлээ. Иончлолын магадлал нь пульсийн урт болон лазерын эрчмээс хамаарах бөгөөд лазерын эрчим өсөхөд магадлал ихсэж, эхний төлөвт үлдэх магадлал багасаж байгаа нь ажиглагдсан.

PACS number : 67.63.Gh, 67.80.Fh, 67.25.dt, 42.60.Rn, 34.50.Gb

I. ОРШИЛ

1960 иад оноос өмнө лазер нь шинэ бүтээл байсан бөгөөд атом ба молекулын гэрэлтэй харилцан үйлчлэх үйлчлэлийг хөндөх онолын нэгдүгээр эрэмбийн хүрээнд тооцоолдог байсан. Лазерын пульсын нээнээр шугаман бус физикт олон фотонор өдөөх ба иончлолын үйл явцыг судлах болсон. 1965 онд Келдыш туннелийн иончлолын [1] өгүүлэг хэвлүүлснээр хүчтэй орны иончлолыг шийдэх арга замууд нь 1980 он хүртэл анхаарал татаж байсан. Атомын өдөөлт, иончлол, болон химийн урвалын өрнөл хувирлын процессын шинж чанарыг лазерын богино пульсээр тандан судлах нь атом молекулын судалгааны шинэ чиглэлийг тодорхойлж байна [2,3]. 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 гурван хэмжээст торын арга, суурь функцээр задлах аргаар бодож байна. Суурь функцийг сонгохдоо атомын хувийн долгион функц эсвэл Волковын [4] функц болон бусад [5,6] функцийг ашиглан

хугацаанаас хамаарсан хоёрдугаар эрэмбийн дифференциал тэгшитгэл гарган авч, уг систем тэгшитгэлийн шийдийг тооцооллын аргаар тодорхойлж байна. Торын аргаар бодохдоо төгсгөлөг ялгавар [7,8] тоон суурь функц [9], төгсгөлөг элемент [10], В-сплайныг [11] ашиглан тооцоог хийсэн байна.

Энэхүү ажилд лазерын богино пульсээр, устөрөгчийн атомыг иончлох процессыг хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлээр илэрхийлж, уг тэгшитгэлээ Кулоны дискрет хувьсагчийн аргаар шийдсэн.

II. ОНОЛ

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

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

$\Psi(\vec{r}, t)$ - 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 ойролцоололд уртын тохируулгаар сонгон авбал [13]:

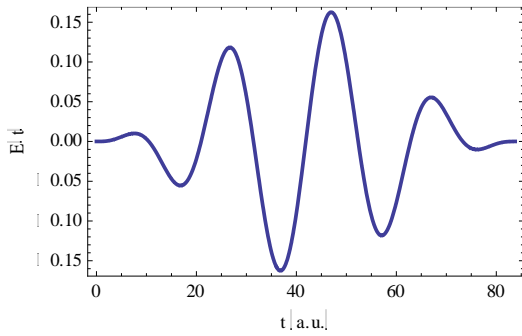
$$\hat{V}(\vec{r}, t) = -\vec{r} \cdot \vec{E}(t) \quad (2)$$

Лазерын цахилгаан орон:

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

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

*Electronic address: aldaraa2004@yahoo.com



Зураг 1: Лазерын цахилгаан орны хугацааны хамаарал

$$(I = 10^{15} \text{ Wm} / \text{cm}^2, \omega = 0.3, \lambda = 152 \text{ nm}, N = 4)$$

хугацааны t эгшинд долгион функц мэдэгдэж байгаа тохиолдолд $t + \Delta t$ эгшин дэх долгион функцийг утгыг олбол [14]:

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

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

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

Долгион функцийг устөрөгчийн тасралтгүй Кулоны долгион функцийг нийлбэр байдлаар илэрхийлсэн [14].

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

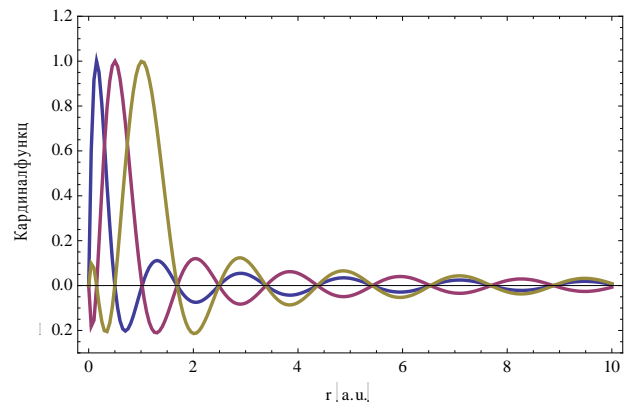
P_l -Лежандрын олон гишүүнт, $g_l(r_i)$ -кардинал функц:

$$g_l(r_i) = \frac{1}{F'(r_i)} \frac{F(r)}{(r - r_i)} \quad (7)$$

Кардинал функцийг хэлбэрийг зураг 2 харуулав.

Бөмбөлөг координатын системд атомын гамилтанионыг бичвэл:

$$\hat{H}_l^0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{r} + \frac{1}{2} \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (8)$$



Зураг 2: Кардинал функц координатын хамаарал

Кулоны долгион функцийг язгууруудыг олж x координатыг дискретчилвэл атомын гамилтанионы H_l^0 нь дараах матриц хэлбэрт шилжинэ [15].

$$[H_l^0]_{ij} = (D_2)_{ij} + V_l(x_i) \delta_{ij} \quad (9)$$

$$(D_2)_{ij} = \frac{1}{3} \left(E_1 + \frac{Z_1}{x} \right), \quad i = j$$

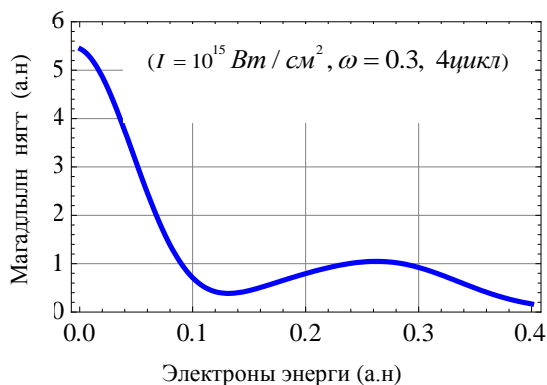
$$(D_2)_{ij} = \frac{1}{(x_i - x_j)^2}, \quad i \neq j \quad (10)$$

H_0 матрицын хувийн утга $E_k(l)$ хувийн векторыг $X_k(l)$ Математика 7.0 програмаар тооцоолов. Тодорхойлогдсон хувийн утгууд нь атомын спектртэй харьцуулахад шууд давхцахгүй боловч ойролцоо спектрийг үзүүлдэг. Үүнд холбоост төлөвөөс гадна тасралтгүй төлөвүүд ч бас дискрет спектртэй байна. Энэ нь хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийн шийдийг хялбар илэрхийлэх боломжийг олгодог. Эдгээр спектрүүдийн хувийн векторууд нь бүрэн суурь функц болох учир хугацаанаас хамаарсан Шредингерийн тэгшитгэлийн долгион функцийг тасралтгүй төлөвийн Кулоны суурь функц дээр задлан, хугацааг хуваах аргаар (5) тэгшитгэлийн шийдийг тооцоолно. Энэхүү ажилд атом нэгжийн системийг ашигласан.

Ш. ТООЦООЛОЛ БА ХАРЬЦУУЛАЛТ

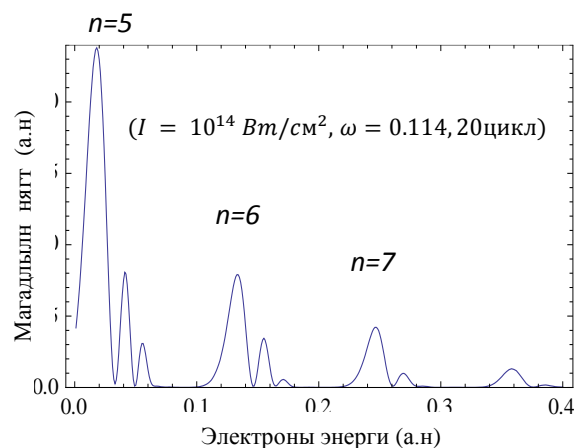
Үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атом хүчтэй лазерын пульсээр харилцан үйлчлэхэд атом иончлох магадлалын нягт электроны энергийн хамаарлыг тооцоолж бусад ажлуудтай үр дүнтэй харьцууллаа. Үндсэн төлөвтөө байгаа устөрөгчийн атом дээр 152 ба 390nm урттай харгалзан 10^{15} ба 10^{14} Вт/см² эрчимтэй лазерын пульсуудыг тусгаж иончлох магадлалын нягт энергиэс хамаарах хамаарлыг тодорхойллоо.

А. Хоёр фотоны шингээлт зонхилсон иончлолын процесс (Зураг 3)



Зураг 3. Устөрөгчийн атом үндсэн төлөвөөс иончлох магадлалын нягт электроны энергийн хамаарал

Б. Олон фотоны шингээлт зонхилсон иончлолын процесс (Зураг 4)



Зураг 4: Устөрөгчийн атом үндсэн төлөвөөс иончлох магадлалын нягт электроны энергийн хамаарал

IV. ДҮГНЭЛТ

Энэ судалгааны ажилд үндсэн төлөвт байгаа устөрөгчийн атомыг хүчтэй лазерын пульс үйлчлэхэд иончлох магадлалын нягт, электроны энергийн хамааралыг тооцоолов. Хоёр ба олон фотоноор явагдах процессыг харьцуулж лазерын пульсын эрчим болон пульсын урт нь

ялгаатай хэлбэр ижилхэн лазерын пульсээр үйлчлэхэд энерги хадгалагдах хууль биелэхээс гадна бидний шинээр эзэмшсэн Кулоны дискрет хувьсагчийн арга нь сайн үр дүнтэй болох нь ажиглагдлаа. Мөн босгоны иончлол болон бага энергитэй олон фотоноор явагдах иончлох үзэгдлүүд ажиглагдаж үр дүн нь Alexei N. Grum-Grzhimailo нарын ажилтай ижил үр дүн өглөө.

- | | |
|---|--|
| <p>[1] Keldysh L V 1964 Zh. Eksp. Teor. Fiz. 47 1945</p> <p>[2] J.L.Hansen, L.Holmegaard, J.H.Nielsen, H.Stapelfeldt and L.B.Madsen, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 45, 015101 (2012).</p> <p>[3] C.D.Lin, T.Morishita, R.Lucchese, A-T. Le, Z.Chen, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43, 122001(2010).</p> <p>[4] L.A.Collins, A.L.Merts, J.Opt.Soc.Am. B7, 647 (1990).</p> <p>[5] Xiaoxin Zhou and C.D.Lin, Phys.Rev.Lett.64, 862 (1990).</p> <p>[6] Q.Su, J.H.Eberly and J.Javanainen, Phys. Rev. Lett. 64, 862 (1990).</p> <p>[7] V.C.Reed, K.Burnett, Phys. Rev. A42, 3152 (1990).</p> <p>[8] J.H.Eberly, J.Javanainen and Q.Su, J. Opt. Soc. Am. B6, 1289 (1989).</p> | <p>[9] B.I.Schneider, Phys. Rev A 55, 3417 (1997).</p> <p>[10] M.Gavrila, J.Shertzer, Phys. Rev. A53, 3431 (1996).</p> <p>[11] Jian Zhang, Lambropoulos, Phys.Rev.Lett. 77, 2186 (1996).</p> <p>[12] Л.Д.Ландау, Е.М. Лифшиц, Физика III, Москва (1974).</p> <p>[13] Frank Grossman, "Theoretical Femtosecond Physics" (2008).</p> <p>[14] Xiao-Min, Tong Shih IChu, Chem. Phys. 217, 119 (1997).</p> <p>[15] Liang-You Peng, Anthony F.Starace The journal of chemical physics 125 154311 (2006)</p> <p>[16] Alexei N. Grum-Grzhimailo, Brant Abeln, Klaus Bartschat, and Daniel Weflen, Phys. Rev. A 81, 043408 (2010)</p> |
|---|--|

