

مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)

بررسی تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا در سامانه‌های دو الکترونی در حضور میدان لیزر فروکوتاه با روش حالت‌های همدوس جفت شده

محمدرضا عیدی^۱، نادر مرشدیان^۲، علیرضا نیکنام^۳ و محسن وفایی^۱

^۱ گروه شیمی فیزیک، گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران

^۲ پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای-پژوهشکده فیزیک پلاسما و گداخت هسته‌ای، تهران ایران

^۳ پژوهشکده لیزر و پلاسما، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران

چکیده

در این مقاله، رفتار حالت پایه سامانه‌های دو الکترونی در حضور تپ لیزر، با روش حالت‌های همدوس جفت‌شده فرمولبندی شده و روابط آن استخراج گردیده است و به صورت عددی پیاده سازی شده است. برای شبیه‌سازی، ابتدا حالت پایه سامانه دو الکترونی مثل مولکول هیدروژن با روش حالت‌های همدوس جفت شده بدست می‌آید سپس این سامانه تحت میدان مطالعه می‌شود. روابط مربوط به تولید هماهنگ‌های مرتبه بالای این سامانه‌های دو الکترونی با روش حالت‌های همدوس جفت شده فرمولبندی و به کار گرفته شده است.

از مهمترین روش‌هایی که در سالیان اخیر برای شبیه‌سازی کوانتومی سامانه‌های اتمی و مولکولی بس‌ذره‌ای چندبعدی وابسته به زمان توسعه داده شده است روش حالت‌های همدوس جفت شده است^[۱-۲]. این روش دارای چند مزیت عمده و درخور توجه است: ۱ - شبیه‌سازی سامانه‌های اتمی و مولکولی بس‌ذره‌ای چند بعدی میسر می‌سازد^[۳]. ۲ - شبکه اولیه حالت‌های همدوس به طور محدود و تصادفی انتخاب می‌شوند. ۳ - تعداد زیادی از جفت‌شدگی‌ها در معادله‌ها، از بین می‌روند. ۴ - اگر چه روش کاملاً کوانتومی است اما از دینامیک کلاسیک برای بررسی حرکت الکترون‌ها (تحول حالت‌های همدوس در زمان‌های حقیقی) بهره می‌بریم. ۵ - در نهایت و مهم‌تر از همه آن که در مورد سامانه‌های مولکولی هیدروژن گونه و پتانسیل کولنی، حالت‌های همدوس بر روی پتانسیل متوسط حرکت می‌کنند که این امر باعث رفع تکینگی‌های کولنی و جایگزینی آن‌ها با تابع خطا می‌شود^[۴]. طبق روش حالت‌های همدوس جفت‌شده، تابع موج یک سامانه M بعدی را می‌توان بر اساس برهم‌نهی N حالت همدوس متحرک نمایش داد

$$|t\rangle = \sum_{k=1}^N D_k(t) \exp\left(i \frac{S_k(t)}{\hbar}\right) |Z_k(t)\rangle. \quad (1)$$

که در این رابطه $|Z_k(t)\rangle$ یک حالت همدوس M بعدی است که در نمایش مکان، این حالت‌های همدوس M بعدی، بسته‌های موج گاوسی با پهنای ثابت γ هستند

$$Z = \prod_{\alpha=1}^M \left(\frac{\gamma_{\alpha}}{\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{\gamma_{\alpha}}{2}(x^{(\alpha)} - q^{(\alpha)})^2 + \frac{i}{\hbar} p^{(\alpha)}(x^{(\alpha)} - q^{(\alpha)}) + \frac{ip^{(\alpha)}q^{(\alpha)}}{2\hbar}\right). \quad (2)$$

شبکه اولیه حالت‌های همدوس طوری دستکاری می‌شود که نتایج برای دو الکترون تمایزناپذیر باشند^[۱]. در شبیه‌سازی مولکول هیدروژن، با در نظر گرفتن تقریب بورن - اپنهایمر، دینامیک کوانتومی کامل دو الکترون را در نظر گرفته‌ایم در حالی که فرض کرده‌ایم دو هسته ثابت هستند. هامیلتونی سامانه مولکولی هیدروژن گونه^[۱] در عدم حضور میدان لیزر:

مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)

$$= \frac{p_{e1}^2}{2} + \frac{p_{e2}^2}{2} - \frac{1}{|\mathbf{r}_{e1} - \mathbf{R}_1|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_{e1} - \mathbf{R}_2|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_{e2} - \mathbf{R}_1|} - \frac{1}{|\mathbf{r}_{e2} - \mathbf{R}_2|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_{e2} - \mathbf{r}_{e1}|} + \frac{1}{|\mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1|}. \quad (۳)$$

در حضور لیزر تنها جمله زیر که از تقریب دوقطبی الکتریکی ناشی می‌شود^[۱]، به جملات بالا اضافه می‌گردد

$$= A_{env}(t) E_0 \cos(\omega t + \varphi) \hat{k} \cdot (\mathbf{r}_{e1} + \mathbf{r}_{e2}). \quad (۴)$$

در رابطه بالا E_0 دامنه میدان الکتریکی، ω فرکانس لیزر و A_{env} پوش میدان لیزر است. در این شبیه‌سازی از یک لیزر چهار چرخه‌ای با پوشی به شکل \sin^2 با پهنای کلی $2/5$ فمتو ثانیه و شدت 10^{15} وات بر سانتی متر مربع و طول موج 390 نانومتر استفاده شده است. برای شبیه سازی سامانه مولکول‌های دوتریم و ترتیم باید هسته‌ها را پویا در نظر گرفت تا جرم آن‌ها نیز وارد محاسبات شود. پویا بودن کامل کوانتومی هسته‌ها مستلزم چشم‌پوشی از تقریب بورن - اپنهایمر است و در نظر گرفتن دینامیک کوانتومی برای هسته‌هاست که اکنون در دسترس نیست. به جای آن می‌توان از معادله دینامیک کلاسیکی نیوتون برای توصیف تقریبی اثر حرکت هسته‌ها بهره برد^[۱]. از روی معادله شرویدینگر رابطه زیر برای بدست آوردن تحول زمانی تابع موج الکترونی در پایه حالت‌های همدوس نامتقارن بدست می‌آید^[۱]

$$= -\frac{i}{\hbar} \sum_k \langle Z_j | Z_k \rangle \delta^2 \tilde{H}(Z_j^*, Z_k) D_k \exp\left(\frac{i(S_k - S_j)}{\hbar}\right) \quad (۵)$$

$$\tilde{H}(Z_j^*, Z_k) = \tilde{H}(Z_j^*, Z_j) - \tilde{H}(Z_j^*, Z_j) - \frac{\partial \tilde{H}(Z_j^*, Z_j)}{\partial Z_j} (Z_k - Z_j) \quad (۶)$$

مقدار انتظاری عملگر \hat{O} در این روش بدین صورت محاسبه می‌گردد^[۱]

$$\hat{O}|\psi\rangle = \sum_{i,j} \langle Z_i | \hat{O} | Z_j \rangle D_i^* D_j \exp\left(i \frac{S_j - S_i}{\hbar}\right) \quad (۷)$$

برای پتانسیل کولنی جاذبه الکترون - هسته و پتانسیل کولنی دافعه الکترون - الکترون به ترتیب می‌توان دید^[۱]

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_{ei} - \mathbf{R}_k|} |Z'\rangle = \langle Z | Z' \rangle \frac{1}{\sqrt{\rho_{i(k)}^2}} \text{cerf}\left(\sqrt{\gamma \rho_{i(k)}^2}\right), \quad \rho_{i(k)} = \frac{Z_{ei}^* + Z'_{ei}}{\sqrt{2\gamma}} - \mathbf{R}_k \quad (۸)$$

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_{e1} - \mathbf{r}_{e2}|} |Z'\rangle = \langle Z | Z' \rangle \frac{1}{\sqrt{\rho_{12}^2}} \text{cerf}\left(\sqrt{\frac{\gamma}{2} \rho_{12}^2}\right), \quad \rho_{12} = \frac{Z_{e1}^* + Z'_{e1}}{\sqrt{2\gamma}} - \frac{Z_{e2}^* + Z'_{e2}}{\sqrt{2\gamma}}. \quad (۹)$$

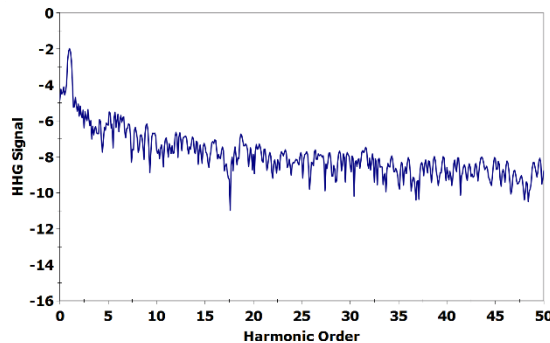
که در این رابطه cerf تابع خطای مختلط است و اندیس i برای الکترون‌ها و اندیس k برای هسته‌ها به کار برده شده‌اند. برای بدست آوردن حالت پایه دقیق سامانه از روش مونت - کارلوی پخشی^[۱] استفاده شده است. با استفاده از روش گرام اشمیت حالت برانگیخته سامانه را نیز بدست آورد. در محاسبه حالت پایه، سامانه حالت‌های همدوس در زمان تحول نمی‌یابند و تنها تابع موج که روی شبکه اولیه بسط داده شده است در زمان‌های موهومی تحول می‌یابد تا انرژی حالت پایه حاصل شود. حالت پایه سامانه مولکول هیدروژن به ازای فاصله‌های بین هسته‌ای متفاوت و شبکه‌های مختلف محاسبه شده و در شکل (۱) به تصویر کشیده شده است. پس از آنکه حالت پایه دقیق سامانه بدست آمد با افزودن جمله مربوط به لیزر به هامیلتونی و تحول حالت‌های همدوس از روابط دینامیک کلاسیکی زیر^[۵]

$$= -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}(Z^*, Z)}{\partial Z^*}, \quad \frac{\partial Z^*}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}(Z^*, Z)}{\partial Z} \quad (۱۰)$$

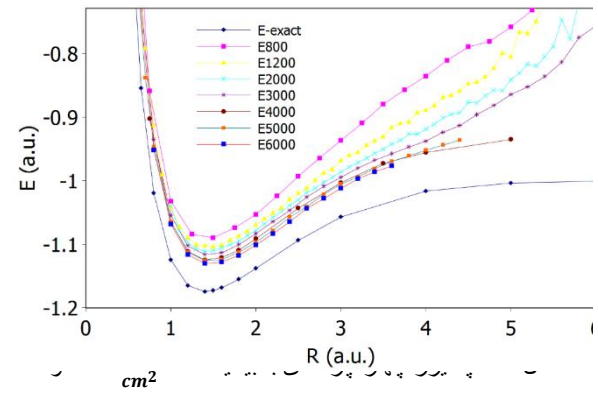
و تحول تابع موج در زمان‌های حقیقی رفتار حالت پایه مورد بررسی قرار می‌گیرد. مقادیر انتظاری مشاهده پذیرهای مختلف مثل مکان، اندازه حرکت خطی و زاویه‌ای، نیروهای کولنی و ... را می‌توان طبق رابطه (۷) محاسبه کرد.^[۱] نرخ‌های یونش مرتبه اول و دوم الکترون‌ها نیز در هر گام زمانی قابل

مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)

محاسبه است.^[۱] از مقدار انتظاری نیروهای کولنی، شتاب هر یک از الکترون‌ها در هر گام زمانی بدست می‌آید و با تبدیل فوریه^[۹] از روی شتاب الکترون‌ها طیف هماهنگ‌های مرتبه بالا بدست می‌آید. برای شبکه‌ای مجموعاً متشکل از ۹۰۰۰ حالت همدوس، طیف هماهنگ‌های مرتبه بالا در شکل (۲) به تصویر کشیده شده است.^[۱]



شکل-۲- طیف هماهنگ مرتبه بالا در مولکول هیدروژن.



طول موج ۳۹۰ نانومتر با پهنای ۲/۵ فمتو ثانیه.

نتیجه‌گیری

شکل (۱) نشان می‌دهد که هر چه تعداد پایه‌های شبکه (حالت‌های همدوس) بیشتر باشد، مقادیر محاسبه شده برای چاه پتانسیل مولکول هیدروژن به مقدار دقیق نزدیک‌تر می‌شود. در شکل (۲) برای طیف هماهنگ‌های مرتبه بالا سامانه مولکول هیدروژن، هر مقدار تعداد حالت‌های همدوس شرکت کننده در شبیه‌سازی بیشتر شود نتایج بهتری حاصل می‌گردد. در شبیه‌سازی برهم‌کنش لیزر با ماده، امید می‌رود این روش جدید امکان مطالعه رفتار وابسته به زمان سامانه‌های دو الکترونی را تحت تپ لیزرهای شدید فروکوتاه فراهم کند و هم‌اکنون تلاش‌هایی در بهبود کمی و کیفی و توسعه این روش در دست اقدام است.

مرجع‌ها

1. Eidi, M., *Study of molecular dynamics of D_2 and T_2 in the presense of ultrashort intense laser field using the Frozen Gaussian method*, personal-second-report under supervision, submitted in *NSTRI*. 2015.
2. Shalashilin, D.V. and M.S. Child, *The phase space CCS approach to quantum and semiclassical molecular dynamics for high-dimensional systems*. *Chemical Physics*, 2004. **304**(1-2): p. 103-120.
3. Shalashilin, D.V. and M.S. Child, *Electronic energy levels with the help of trajectory-guided random grid of coupled wave packets. I. Six-dimensional simulation of H_2* . *J Chem Phys*, 2005. **122**(22): p. 224108.
4. Kirrander, A. and D.V. Shalashilin, *Quantum dynamics with fermion coupled coherent states: Theory and application to electron dynamics in laser fields*. *Physical Review A*, 2011. **84**(3).
5. Shalashilin, D.V. and I. Burghardt, *Gaussian-based techniques for quantum propagation from the time-dependent variational principle: Formulation in terms of trajectories of coupled classical and quantum variables*. *J Chem Phys*, 2008. **129**(8): p. 084104.
6. Shalashilin, D.V. and M.S. Child, *A version of diffusion Monte Carlo method based on random grids of coherent states. II. Six-dimensional simulation of electronic states of H_2* . *J Chem Phys*, 2005. **122**(22): p. 224109.
7. Shalashilin, D.V., M.S. Child, and A. Kirrander, *Mechanisms of double ionization in strong laser field from simulation with Coupled Coherent States: Beyond reduced dimensionality models*. *Chemical Physics*, 2008. **347**(1-3): p. 257-262.
8. Symonds, C., et al., *Coupled-coherent-states approach for high-order harmonic generation*. *Physical Review A*, 2015. **91**(2).

مقاله نامه بیست و دومین کنفرانس بهاره فیزیک (۳۱-۳۰ اردیبهشت ۱۳۹۴)

9. Ahmadi, H., et al., *Effect of nuclear motion on high-order-harmonic generation of H_2^+ in intense ultrashort laser pulses*. Physical Review A, 2014. **90**(4).