



بیست و ششمین کنفرانس اپتیک و  
فوتونیک ایران و دوازدهمین کنفرانس  
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،  
دانشگاه خوارزمی،  
تهران، ایران.  
۱۶-۱۵ بهمن ۱۳۹۸



## بررسی تاثیرافزایش شدت تپ لیزر فمتوثانیه بر تولید هماهنگ های مرتبه بالا و تولید پالس آتوثانیه در مولکول فلوئور

زهرا خدابنده، محمد منفرد، رسول صدیقی بنابی و محمدحسین مجلس آرا

std\_zahrakhodabandeh@khu.ac.ir, mmonfared@physics.sharif.edu, sadighi@sharif.edu, majlesara@khu.ac.ir

چکیده - در این مقاله تاثیر افزایش شدت پالس بر روی طیف هماهنگ ها و تولید تپ آتوثانیه برای مولکول فلوئور تحت تابش یک میدان لیزری فمتوثانیه با قطبش خطی مورد مطالعه قرار گرفته است. این بررسی از طریق نظریه تابعی چگالی وابسته زمان در سه بعد و با کد اختاپوس انجام شده است. افزایش شدت تپ تابشی باعث افزایش فرکانس قطع و کاهش پهنای زمانی تپ آتوثانیه خروجی می شود.

کلیدواژه- تولید هماهنگ مراتب بالا، تپ آتوثانیه

### The Influence of increasing of laser field intensity on high-order harmonic spectrum and attosecond generation in the fluorine molecule

Zahra. Khodabandeh, Mohammad. Monfared, R. Sadighi-Bonabi, and Mohammad Hossein.Majles ara

std\_zahrakhodabandeh@khu.ac.ir, mmonfared@physics.sharif.edu, sadighi@sharif.edu, majlesara@khu.ac.ir

Abstract- The Influence of increasing of laser field intensity on high-order harmonic spectrum and attosecond generation by femtosecond laser field with linear polarization is investigated in the fluorine molecule. This **investigation** is done using time-dependent density functional theory in a three-dimensional space by Octopus code. Increasing the intensity of the pulsed laser fields cause enhancement of the cutoff frequency and reduction of the output pulse durations.

Keywords: high-order harmonic generation, cutoff, attosecond generation

## مقدمه

پالس‌های هم‌دوس آتوتانیه در محدوده فرابنفش دور و اشعه ایکس، در کاوش و تصویربرداری پدیده‌هایی که در ابعاد اتمی و زیر اتمی، در زمان آتوتانیه رخ می‌دهند، کاربرد بسیاری دارند [۱ و ۲]. تولید هماهنگ‌های مراتب بالا<sup>۱</sup> (HHG)، یکی از روش‌های تولید چنین پالس‌هایی می‌باشد. تولید هماهنگ‌های مراتب بالا یک فرآیند اپتیک غیرخطی است که در طی برهم‌کنش یک لیزر پر شدت با یک گاز (اتمی یا مولکولی) اتفاق می‌افتد.

با کانونی کردن پرتو لیزر فمتوثانیه تقویت شده با توان  $10^{13}$ - $10^{15}$  W/cm<sup>2</sup> بر اتم یا مولکول قابل دستیابی است [۳]. برای توصیف HHG نظریه مدل «سه گام»<sup>۲</sup> ارائه شد [۴ و ۵]. براساس این مدل، ابتدا الکترون به روش تونل زنی تحت تاثیر میدان لیزر یونیزه می‌شود؛ سپس در میدان لیزر شتاب گرفته و با معکوس شدن جهت میدان لیزر، الکترون به سمت یون مادر برمیگردد. این الکترون با یون مادر بازترکیب می‌شود. الکترون بازترکیب شده انرژی جنبشی و یونش را به صورت فوتون گسیل می‌کند. پیشینه‌ی انرژی فوتون گسیل شده را انرژی قطع می‌نامند و از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$E_{cutoff} = h\nu_{max} = I_p + 3.17U_p \quad (۱)$$

که  $U_p$  پتانسیل پاندرماتیو ناشی از میدان لیزر می‌باشد و از رابطه زیر قابل محاسبه است:

$$U_p = \frac{E^2}{4\omega_L^2} = 0.93 \times 10^{-13} I \left( \frac{w}{cm^2} \right) \lambda_L^2 (\mu m^2) \quad (۲)$$

در رابطه فوق  $E$  میدان لیزر،  $\omega_L$  فرکانس زاویه ای آن،  $I$  شدت لیزر و  $\lambda_L$  طول موج آن است.

در این مقاله به بررسی تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا در اثر تابش تپ لیزر فمتوثانیه با طول موج  $800 \text{ nm}$  و شدت‌های مختلف  $0.15 \frac{PW}{cm^2}$ ،  $0.2 \frac{PW}{cm^2}$  و  $0.25 \frac{PW}{cm^2}$  بر مولکول فلئور می‌پردازیم. تاثیر افزایش شدت بر طیف هماهنگ مرتبه بالا و نمودار شدت بر حسب زمان را بررسی می‌

کنیم. در تمامی محاسبات از واحد‌های اتمی استفاده شده است مگر اینکه خلاف آن بیان شود.

## روش‌های محاسباتی

محاسبات شامل دو قسمت است بخشی از محاسبات توسط نرم افزار اختاپوس و بخش دیگر توسط برنامه متلب صورت گرفته است. به صورت سه بعدی و با کمک نظریه (TDDFT) تابعی چگالی وابسته به زمان و با انتخاب تابع پتانسیل تبادلی-همبستگی SIC-LDA انجام شده است. ابتدا ممان دوقطبی سیستم توسط تابع موج وابسته به زمان مطابق رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$\mathbf{d}(t) = \langle \Psi(t) | \mathbf{r}(t) | \Psi(t) \rangle \quad (۳)$$

سپس طیف هماهنگ‌های HHG از طریق رابطه (۴) با قرار دادن ممان دوقطبی سیستم مشخص شده قابل محاسبه است:

$$H(\omega) = \left| \frac{1}{T_{tot}} \int_0^{T_{tot}} \mathbf{d} \exp(-i\omega t) dt \right| \quad (۴)$$

در رابطه فوق  $T_{tot}$  تپ

خروجی بر حسب زمان یعنی تبدیل فوریه  $\pi(\omega)$  بر طبق رابطه زیر قابل محاسبه است:

$$I(t) = \left| \sum_q a_q e^{iq\omega t} \right|^2, \quad a_q = \int \ddot{\mathbf{d}}(t) e^{-iq\omega t} dt$$

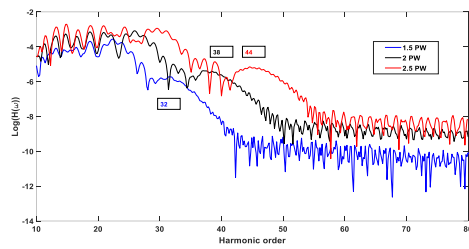
$a_q$  تبدیل فوریه مشتق دوم ممان دوقطبی می‌باشد.

شکل میدان لیزر تابشی قطبیده خطی با دامنه  $A = \sqrt{\frac{cl}{8\pi}}$  به صورت زیر است:

$$E = A \left( \sin\left(\frac{\pi t}{NT}\right) \right)^2 \cos(\omega t) \quad (۶)$$

<sup>۲</sup> Three step model

<sup>۱</sup> High Harmonic Generation (HHG)



شکل ۲: طیف هماهنگ های تولید شده در تابش تپ لیزر با شدت های ۰،۱۵، ۰،۲ و ۰،۲۵ پتاوات بر سانتیمتر مربع.

فرکانس قطع برای شدت  $0,15 \frac{PW}{cm^2}$  در مرتبه هارمونیک ۳۲، برای شدت  $0,2 \frac{PW}{cm^2}$  در مرتبه ۳۸ و برای شدت  $0,25 \frac{PW}{cm^2}$  در مرتبه ۴۴ می باشند. مقدار عددی فرکانس قطع از مدل نیمه کلاسیک قابل پیش بینی است زیرا انرژی گسیلی در فرکانس قطع، بیشترین مقدار انرژی جنبشی الکترون در لحظه باز ترکیب می باشد. طبق مدل لئونشتاین<sup>۳</sup> که در واقع تصحیح شده رابطه (۱) است، بیشینه انرژی گسیلی از رابطه (۷) قابل محاسبه است:

$$\omega_{cutoff} = 1.3I_p + 3.17U_p \quad (7)$$

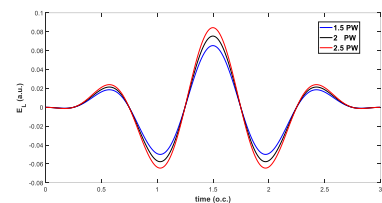
طبق این رابطه مقادیر پیش بینی شده فرکانس قطع برای میدان ها با شدت های ۰،۱۵، ۰،۲ و ۰،۲۵ به ترتیب ۳۲، ۳۸ و ۴۴ برابر فرکانس تابشی می باشد که در تطابق کامل با طیف هماهنگ در شکل (۲) است.

#### بررسی تاثیر شدت میدان لیزری بر پهنای تپ آوتونانیه

تپ های آوتونانیه، از طریق برهم نهی چندین هماهنگ متوالی تولید می شوند. در شکل ۳ بازه هایی از هماهنگ ها که در برهم نهی انتخاب کرده ایم نشان داده شده است. برای میدان های تابشی با شدت های ۰،۱۵، ۰،۲ و ۰،۲۵  $\frac{PW}{cm^2}$  به ترتیب از بازه های مراتب هماهنگ ۲۴-۳۸، ۲۰-۳۲ و ۳۰-۴۴ استفاده شده است. پهنای تپ های خروجی به ترتیب ۴۲۹، ۳۸۸ و ۳۰۹ آوتونانیه می باشد، با افزایش

در این مقاله طول موج مرکزی تپ لیزر 800 nm معادل  $\omega = 0.057 a.u$ ، دوره تناوب میدان و  $n = 3$  تعداد چرخه میدان لیزر می باشد. شدت های اعمال شده  $1.5 \times 10^{14} \frac{W}{cm^2}$ ،  $2 \times 10^{14} \frac{W}{cm^2}$  و  $2.5 \times 10^{14} \frac{W}{cm^2}$  می باشند. انتخاب این بازه به دلیل موثر بودن آنها در یونش تونل زنی و احتمال بالا در باز ترکیب الکترون یونیزه شده با یون مادر است.

نمودار سه میدان در شکل ۱ آمده است.



شکل ۱: شکل میدان های لیزر با شدت های ۰،۱۵، ۰،۲ و ۰،۲۵ پتاوات بر سانتیمتر مربع.

شکل میدان های لیزر اعمالی در شکل ۱ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود هر سه دارای فاز یکسان ولی شدت های ۰،۱۵، ۰،۲ و ۰،۲۵ پتاوات بر سانتی مترمربع می باشند. محور افقی، زمان برحسب چرخه اپتیکی و محور عمودی، میدان برحسب واحد اتمی نشان داده شده است.

## نتایج

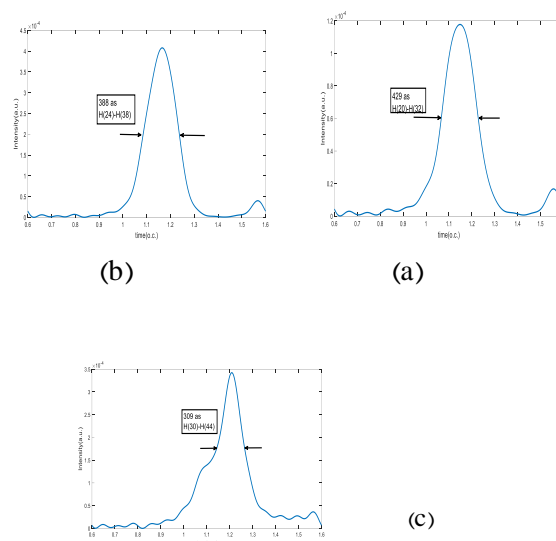
#### بررسی تاثیر شدت میدان لیزری بر طیف هماهنگ های مرتبه بالا

شکل ۲ طیف هماهنگ های مرتبه بالا با شدت های مختلف را نشان می دهد. نمودار آبی، مشکی و قرمز مربوط به تپ لیزر با شدت های به ترتیب ۰،۱۵، ۰،۲ و ۰،۲۵  $\frac{PW}{cm^2}$  می باشند. همان طور که ملاحظه می شود با افزایش شدت میدان، شدت طیف هماهنگ ها بیشتر شده و فرکانس قطع نیز افزایش یافته است.

[4] Lewenstein M., Balcou P., Ivanov M. Y., L'huillier A., Corkum P. B., "Theory of highharmonic generation by low-frequency laser fields", *Physical Review A*. 1994 Mar 1;49(3):2117.

[۵] P. B. Corkum, *Phys. Rev. Lett.* 71, 1994 (1993).

شدت میدان اعمالی، پهنای زمانی تپ های خروجی نیز کاهش یافته است.



شکل ۳: نمودار (شدت-زمان)، پهنای زمانی تپ خروجی آتوئانیه و بازه انتخابی در هماهنگی ها، نمودارهای a و b و c به ترتیب متعلق به تپ های حاصل از شدت های ۰.۲، ۰.۱۵، و ۰.۲۵  $\frac{PW}{cm^2}$  می باشد.

### نتیجه گیری

افزایش شدت میدان های تپ تابشی یکی از راه های موثر و مهم برای تولید هماهنگ های مرتبه بالا با فرکانس قطع بالا و تولید پالس آتوئانیه کوتاهتر می باشد زیرا با افزایش شدت میدان تابشی، الکترون ها با انرژی جنبشی بیشتری با یون مادر بازترکیب شده و انرژی گسیلی بیشتر می شود. کوتاهترین تپ آتوئانیه با اعمال میدان تک رنگی بر اثر تابش تپ فمتوئانیه بر مولکول فلئور ۳۰۹ as است.

### مرجع ها

- [1] Li Y., Zhu X., Lan P., Zhang Q., Qin M., Lu P., "Molecular-orbital tomography beyond the plane-wave approximation", *Physical Review A*. 2014 Apr 25;89(4):045401
- [2] Haessler S., Caillat J., Salieres P., "Selfprobing of molecules with high harmonic generation", *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2011 Sep 26;44(20):203001
- [3] Winterfeldt C., Spielmann C., Gerber G., "Colloquium: Optimal control of highharmonic generation", *Reviews of Modern Physics*. 2008 Jan 2;80(1):117.