



بیست و پنجمین کنفرانس اپتیک و  
فوتونیک ایران و یازدهمین کنفرانس  
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،  
دانشگاه شیراز،  
شیراز، ایران.  
۹-۱۱ بهمن ۱۳۹۷



## هماهنگ‌های بالا از مولکول $H_2He^{2+}$ در میدان پلاسمونیک

رضا آقبلاغی، سهیلا مجیدی، مصطفی آقازاده

گروه مهندسی اپتیک و لیزر دانشگاه بناب، آذربایجان شرقی - بناب - بزرگراه ولایت

[r.ghbolaghi@gmail.com](mailto:r.ghbolaghi@gmail.com)

چکیده - در این مقاله، به منظور بررسی اثر میدان پلاسمونیک بر روی نقطه قطع طیف هماهنگ بالا، ابتدا میدان لیزری به  $H_2He^{2+}$  در حضور نانو ذره طلا تابانده می‌شود، سپس هماهنگ‌های بالای حاصل از برهم کنش میدان افزایشی پلاسمونیک با مولکول  $H_2He^{2+}$  محاسبه و نتایج آن با اتم هیدروژن و اتم هلیوم مقایسه می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که مرتبه قطع  $H_2He^{2+}$  بیشتر از دو اتم دیگر است بنابراین برای تولید هماهنگ بالاتر استفاده از  $H_2He^{2+}$  نسبت به اتم دیگر بهینه تر است.

کلیدواژه - تولید هماهنگ بالا، میدان لیزری قوی، میدان افزایشی پلاسمونیک، نانو ذرات طلا

## High Harmonic Generation from $H_2He^{2+}$ Molecules in Plasmonic Field

Reza Aghbolaghi, Soheila Majidi, Mostafa Aghazadeh

Department of Engineering Optic and Laser, university of Bonab ([sohilamajidi@gmail.com](mailto:sohilamajidi@gmail.com))

Abstract- In this article, in order to investigate the effect of the plasmonic field on the cut off position in high harmonic spectrum, laser field is incident on  $H_2He^{2+}$  molecules and the gold nanoparticles. Then, high harmonic spectrum obtained from interaction between the plasmonic fields with  $H_2He^{2+}$  molecules is calculated and compared with the hydrogen and helium atoms. Our results show that the cut off  $H_2He^{2+}$  molecules is more than two other atoms, so it is more efficient to use  $H_2He^{2+}$  molecules than two other atoms to produce higher harmonics.

Keywords: High harmonic generation, Strong laser field, plasmonic field, Spherical gold nanoparticles.

در این شبیه سازی، طیف هماهنگ بالا با استفاده از حل عددی معادله شرودینگر در یک بعد محاسبه می شود. (در کل محاسبات از واحد اتمی استفاده می شود)

$$i \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = H(t)\psi(x,t) = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_a + V_L(x,t)\right]\psi(x,t) \quad (1)$$

اینجا  $V_a(x) = -1/\sqrt{x^2+a^2}$  پتانسیل کولنی هموار،  $a$  ثابت هموارسازی اتم است که برای اتم های مختلف مقادیر مختلف دارد.  $V_L(x,t) = E(x,t)x$  پتانسیل ناشی از اندرکنش لیزر و اتم است که در اینجا اتم هیدروژن و هلیوم به کار رفته است. در اینجا علاوه بر اتم های هیدروژن و هلیوم، از یون مولکول  $H_2He^{2+}$  استفاده شده است که معادله شرودینگر برای به صورت زیر تغییر خواهد کرد [۶]:

$$i \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = H(t)\psi(x,t) = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_{ion} + V_c(x,t)\right]\psi(x,t) \quad (2)$$

که پتانسیل کولنی  $v_{ion} = \frac{q_{He}q_H}{\sqrt{R^2+a}} - \frac{q_H}{\sqrt{(z-z_H)^2+b}} - \frac{q_{He}}{\sqrt{(z-z_{He})^2+b}}$  هموارنرم برای یون مولکول است.  $R$  فاصله بین دو هسته هلیوم و هیدروژن،  $Z$  مکان الکترون نسبت به مرکز جرم دو هسته،  $q_H = 1$  و  $q_{He} = 2$  بار الکتریکی دو هسته است  $Z_H = \frac{M_{He}R}{M_{He}+M_H}$  و  $Z_{He} = -\frac{M_H R}{M_{He}+M_H}$  که به ترتیب پتانسیل هسته هلیوم و هیدروژن هستند. پتانسیل اندرکنشی  $H_2He^{2+}$  و میدان لیزری هست:

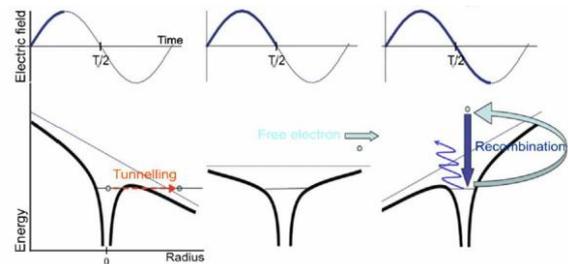
$$V_c(t) = \left[ \frac{q_{He}M_H - q_H M_{He}}{M_H + M_{He}} R + \left(1 + \frac{q_H + q_{He} - 1}{M_H + M_{He}} z \right) \right] E(x,t)$$

میدان لیزری  $E(x,t)$  اولیه به ازای اتم ها و یون ها یکسان است. وابستگی فضایی میدان را می توان بصورت عبارت اختلال و تقریب دوقطبی تعریف کرد منجر به رابطه

$$E(x,t) = E_0 f(t) \exp(-x/X) \sin \omega t \quad (3)$$

در راستای  $x$  پلاریزه شده،  $E_0$  پیک دامنه،  $\omega$  فرکانس و  $f(t)$  بسته فاز است. میدان پلاسمونیک با  $\exp(-x/X)$

تولید هماهنگ بالا (HHG) یک فرآیند غیرخطی است که با استفاده از تئوری نیمه کلاسیکی که توسط کورکوم [۱] و کالاندر [۲] و کوانتومی که توسط لونشتاین [۳] ارائه شده، تشریح شود. در مدل سه مرحله ای، لیزر فمتوثانیه به اتم برخورد می کند. این میدان قوی بر پتانسیل کولنی غلبه کرده و آن را خم می کند، در نتیجه یک سد ایجاد می کند. (۱) الکترون از سد ایجاد شده تونل زنی می کند. (۲) الکترون رها شده در میدان لیزری شتاب می گیرد و انرژی جنبشی کسب می کند، با تغییر جهت میدان الکترون به سمت یون برمی گردد. (۳) در اثر باز ترکیب الکترون با یون مادر، انرژی جنبشی کسب شده به صورت فوتون ( $XUV$ ) تابش می کند (شکل ۱).



شکل (۱) شکل های بالا تغییرات میدان الکتریکی و شکل های پایین اندرکنش میدان و اتم را نشان می دهد که معادل با مدل سه مرحله است.

مکانیزم فیزیکی HHG بر مبنای پلاسمونیک: پالس کم شدت فمتوثانیه با مد پلاسمون جفت می شود نوسان پیوسته میان بارهای آزاد فلز انجام می دهند. منجر به افزایش رزنانس میدان داخلی موضعی در نزدیکی نانوساختار می شود [۴]. افزایش برای غلبه بر شدت آستانه خوب است. با تزریق گازهای نجیب در سمت میدان افزایش یافته، HHG می تواند تولید شود [۵].

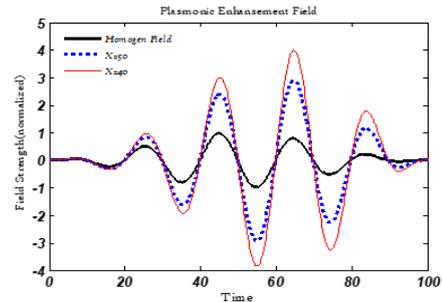
در این مقاله، یک بار معادله شرودینگر را برای اتم های  $H_2He^{2+}$  و هیدروژن و هلیوم را به صورت عددی حل شده است و هماهنگ های مرتبه بالا را در میدان همگن لیزری و غیرهمگن پلاسمونیک شبیه سازی شده است و سپس نتایج شبیه سازی با هم مقایسه می شود.

مقادیر طول موج پرتو الکترومغناطیسی هم‌دوس و شدت پالس به ترتیب برابر با طول موج  $\lambda = 720\text{nm}$  با پهنای پالس  $13\text{fs}$  و  $I = 5 \times 10^{13} \text{W/cm}^2$  می‌باشند این پارامترها با در نظر گرفتن شرایط تجربی در نظر گرفته شده‌اند [۷].

### نتایج و بحث

در ابتدا تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا را در غیاب نانوذرات فلزی طلا (میدان همگن لیزر) و سپس در حضور نانوذرات فلزی که باعث ایجاد میدان پلاسمونیک می‌شود، را بررسی می‌کنیم. در شکل (۳) طیف حاصل از میدان همگن (در غیاب میدان پلاسمونیک) است که مرتبه قطع آن برای اتم هیدروژن (رنگ آبی) در هماهنگ ۸۳ و مرتبه قطع برای اتم هلیوم (رنگ سیاه) در هماهنگ ۸۷ و مرتبه قطع برای اتم  $H_2He^{2+}$  (رنگ قرمز) در هماهنگ ۹۲ قرار دارد نشان داده شده است و با انتخاب  $X = 50$ ، یعنی حضور نانوذرات که باعث میدان پلاسمونیک می‌شود. در شکل (۴) که مرتبه قطع آن برای اتم هیدروژن (رنگ آبی) در هماهنگ ۱۳۶ و مرتبه قطع آن برای اتم هلیوم (رنگ سیاه) در هماهنگ ۱۳۹ و مرتبه قطع برای اتم  $H_2He^{2+}$  (رنگ قرمز) در هماهنگ ۱۴۴ افزایش می‌یابد این بدین معنی است که میدان پلاسمونیک باعث افزایش هماهنگ قطع می‌شود. حال می‌خواهیم تاثیر اندازه میدان پلاسمونیک بر روی تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا را بررسی کنیم. همچنان که اشاره کردیم با کاهش  $X$ ، میدان پلاسمونیک افزایش می‌یابد. با انتخاب  $X = 40$ ، به این نتیجه رسیدیم که با افزایش میدان ناحیه تخت نسبت به میدان قبلی افزایش پیدا کرده است. که در شکل (۵) مرتبه قطع آن برای اتم هیدروژن در هماهنگ ۱۷۱ و مرتبه قطع آن برای اتم هلیوم در هماهنگ ۱۷۷ و مرتبه قطع برای اتم  $H_2He^{2+}$  (رنگ قرمز) در هماهنگ ۱۸۵ افزایش می‌یابد شکل (۳).

مشخص شده است که هم به اندازه و جنس نانوساختار کرومی مورد استفاده بستگی دارد [۶]. ثابت  $X$  غیرهمگنی ناشی از نانوذره است. تغییر  $X$  معادل با انتخاب نوع نانوذره‌ی مورد استفاده است. شکل ۲ مقایسه میدان همگن لیزری و غیر همگن پلاسمونیک را نشان می‌دهد.



شکل ۲) مقایسه میدان لیزری همگن (نمودار سیاه) با میدان افزایشی غیر همگن پلاسمونیک نمودار قرمز  $X = 40$ ، و آبی  $X = 50$ .

در ابتدا میدان همگن است با حضور نانوذرات طلا میدان غیرهمگن شده، اگر نور به نانو ذرات طلا برخورد کند، زمانی که میدان لیزری به یک نانوذره اعمال می‌شود الکترون‌های رسانش برانگیخته می‌شوند و بدین ترتیب دو قطبی‌های نوسانی شدید بنام پلاسمون‌ها ایجاد می‌شود. در اینجا نانو ذره کرومی از جنس طلا است و از پالس لیزر به شکل پالس  $\sin^2$  استفاده شده است.

$$f(t) = \sin^2\left(\frac{\omega t}{2np}\right) \quad (4)$$

$np$  تعداد کل چرخه‌های اپتیکی است پس پهنای پالس برابر  $\tau = 2\pi np / \omega$  است. در تقریب تک الکترون فعال، هماهنگ حاصل از یک اتم یا مولکول با تبدیل فوریه شتاب الکترون فعال [۱] متناسب است، که بصورت زیر می‌باشد:

$$I(t) = |f \omega|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt \right|^2 \quad (5)$$

$f(t)$  با استفاده از رابطه زیر بدست می‌آید:

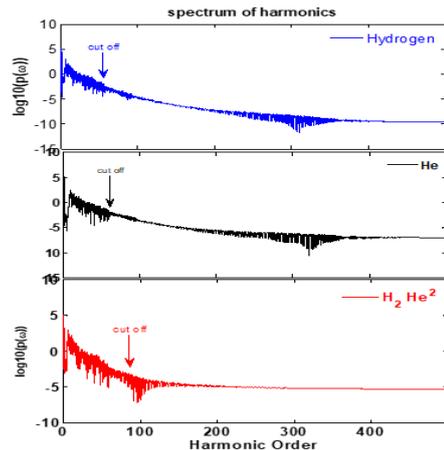
$$f(t) = \left\langle \psi(x,t) \left| -\frac{d\psi(x)}{dx} + E(t) \right| \psi(x,t) \right\rangle \quad (6)$$

### نتیجه گیری

ما یک مطالعه تئوری از تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا در گازهای هیدروژن و هلیوم و  $H_2He^{2+}$  را به وسیله میدان الکتریکی غیرهمگن فضایی را ارائه کردیم. این میدان زمانی که نانوساختارهای متفاوت در معرض تابش پالس کوتاه و قوی قرار می‌گیرند، تولید می‌شود، جنس فلز و ساختار هندسی نانوساختار مورد استفاده در تولید هماهنگ‌ها اهمیت زیادی دارند. با توجه به نتایج بدست آمده از روش عددی استفاده از میدان الکتریکی غیرهمگن باعث افزایش مرتبه هماهنگ ناحیه قطع نسبت به میدان الکتریکی همگن می‌شود و تاثیر میدان افزایشی بر روی سه ماده یکسان بود. همچنین با مقایسه طیف‌های هماهنگ‌های مرتبه بالای گاز هیدروژن و هلیوم و  $H_2He^{2+}$  در شکل‌های ۲ و ۳ و ۴ می‌بینیم که مرتبه قطع  $H_2He^{2+}$  بیشتر از دو ماده دیگر است و مرتبه قطع هلیوم بیشتر از گاز هیدروژن است. افزایش مرتبه ناحیه قطع در تولید پالس‌های آتوثانیه از اهمیت زیادی برخوردار است. هرچه مرتبه قطع بیشتر و ناحیه تخت گسترده‌تر باشد پالس آتوثانیه تولید شده کوتاه تر خواهد بود. نتایج شبیه سازی نشان می‌دهد که استفاده از  $H_2He^{2+}$  در میدان پلاسمونیک نسبت به دو اتم دیگر بهینه تر است

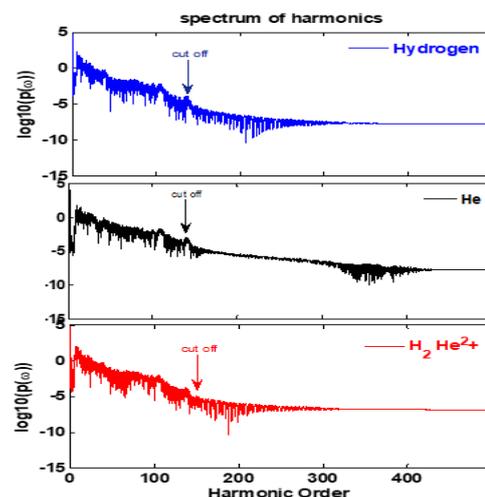
### مرجع‌ها

- [1] P.B. Corkum and F.Kraus; "Attosecond science"; nature Physics3 (2007)381-387.
- [2] D.Hongchuan, W.Huiqiao and B.Hu Phys. Rev. Let. 81 (2010) 063813.
- [3] G.T.Zhang, J.Wu.C.L.Xia and X. Shen Phys. Rev. Let. 80 (2009) 055404.
- [4] P. B. Corkum, Phys. Rev. Let. 71 (1993) 1994
- [5] I.-Y. Park, S. Kim. J. Choi, D.-H. L. Y.-J. Kim, M. F. Kling, M. I. Stockman. And S.-W. Kim, Nat. Phot. 5 (2011) 677
- [6] A. Husakou, S.-J. Im, and J. Herrmann, Phys. Rev. A 83(2011) 043839



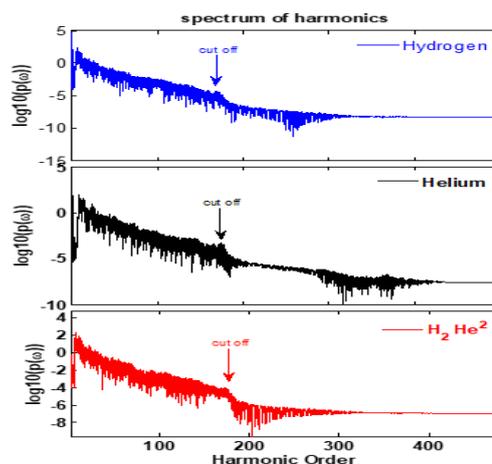
شکل ۳) تولید هماهنگ مرتبه بالا با طول موج لیزر  $\lambda = 720nm$  با

$$I = 5 \times 10^{13} W/cm^2 \text{ و } 13fs \text{ پالس}$$



شکل ۴) تولید هماهنگ مرتبه بالا با طول موج لیزر  $\lambda = 720nm$  با

$$X = 50 \quad I = 5 \times 10^{13} W/cm^2 \text{ و } 13fs \text{ پالس}$$



شکل ۵) تولید هماهنگ مرتبه بالا با طول موج لیزر  $\lambda = 720nm$  با

$$X = 40 \quad I = 5 \times 10^{13} W/cm^2 \text{ و } 13fs \text{ پالس}$$