بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و چهاردهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه شهید چمران اهواز،
خوزستان، ایران.
۱۴-۱۲ بهمن ۱۴۰۰

اثر قطبش تپ لیزر فرودی در تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا از مولکول کلرین

احمدرضا مدهنی[۱]، الناز ایرانی[۱]، امین صادقی فراز[۱]، محمد منفرد[۲]

[۱]دانشکده علوم پایه گروه اتمی-مولکولی دانشگاه تربیت مدرس، خیابان جلال آل احمد، تهران

[۲]انستیتو نظریه ماده چگال و اپتیک، دانشگاه فردریچ-شیلر ینا، ینا، آلمان.

Madhani840@gmail.com

چکیده – در این پژوهش اثر قطبش میدان الکتریکی لیزر فمتوثانیه در برهم کنش‌با مولکول کلرین برای تولید هماهنگ های مرتبه بالا و تپ آتوثانیه خروجی بررسی شده است. در این بررسی قطبش های خطی و بیضوی برای لیزر فمتوثانیه مفروض شده اند و محاسبات به کمک نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان و در فضای حقیقی سه بعدی انجام شده است. نتایج حاکی از افت شدت هماهنگ ها و کاهش شدت تپ‌های آتوثانیه خروجی‌به ازای افزایش‌پارامتر قطبش‌پذیری لیزر فمتوثانیه است. تحلیل شدت هماهنگ ۲۴ام (بعنوان هماهنگی در محدوده فرکانس قطع) نشان می دهدبا افزایش مقدار قطبش‌پذیری لیزر فمتوثانیه از مقدار صفر به ۰/۲ (۰/۴)، شدت این هماهنگ حدود یک (دو) مرتبه بزرگی کاهش می یابد. همچنین نتایج این پژوهش نشان می دهد که تغییر قطبش‌پالس فرودی از حالت خطی‌به حالت بیضوی، منجربه کاهش شدت‌تپ آتوثانیه خروجی و افزایش پهنای آن ها می شود.

کلید واژه- پالس آتوثانیه، تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا، مولکول کلرین، نظریه تابعی چگالی وابسته زمانی

Effect of laser pulse polarization on high harmonic generation from chlorine molecule

Ahmad Reza Madhani[1], Elnaz Irani[1], Amin Sadeghi Faraz[1] and Mohammad Monfared[2]

[1] Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, P.O. Box 14115-175, Tehran, Iran.

[2]Institute of Condensed Matter Theory and Optics, Friedrich-Schiller-University Jena, Max-Wien-Platz 1, Jena D-07743, Germany.

Madhani840@gmail.com

Abstract- In this study, the effect of femtosecond laser polarization on the high harmonic generation and generated attosecond pulse from the chlorine molecule has been studied. linear and elliptical polarizations have been assumed for the femtosecond laser and calculations have been performed using time-dependent density functional theory in the three-dimensional real space. The results show a decrease in the intensity of the harmonics and the attosecond pulses when the ellipticity of the femtosecond laser is increased. Analyzing the intensity of the 24th harmonic order demonstrates that by increasing the ellipticity of the femtosecond laser from zero to 0.2 (0.4), the intensity of this harmonic decreases by about one (two) order of magnitude. The results of this research also show that changing the polarization of the driving pulse from linear to elliptical, reduces the intensity of the output attosecond pulse and increases their width.

Keywords: Attosecond pulse, High harmonic generation, Chlorine molecule, Time dependent density functional theory

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]

مقدمه

مقیاس زمانی رویداد دینامیک الکترون در اتم‌ها ، مولکول‌ها و مواد چگال در مرتبه آتوثانیه است. تولید تپ‌های نوری آتوثانیه برای مشاهده و کنترل حرکت الکترون و ردیابی دینامیک آن در حال حاضر از پیشروترین پدیده‌ها در اپتیک فوق سریع است. یکی از روش‌های تولید تپ‌های آتوثانیه، تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا است که توسط نظریه نیمه کلاسیکی سه گام که اولین بار در سال ۱۹۹۳ توسط کرکوم ارائه شد، درک می‌شود[۱]. طبق این نظریه، زمانی که اتم یا مولکول با میدان قوی لیزر برهمکنش می‌کند الکترون به روش تونل‌زنی از قید هسته خارج می‌شود و سپس در میدان لیزر شتاب می‌گیرد. با تغییر علامت میدان لیزر، الکترون در جهت مخالف به سمت یون مادر شتاب می‌گیرد. این الکترون می‌تواند با یون مادر باز ترکیب شده و انرژی جنبشی خود را به علاوه انرژی یونش در غالب یک فوتون گسیل می‌کند. فوتونی که با بیشترین انرژی طی این فرآیند گسیل می‌شود، فوتون با انرژی قطع نیز نامیده می‌شود که مقدار آن برابر با $1.3I_p + 3.17U_p$ می‌باشد. I_p انرژی یونش سیستم اتمی یا مولکولی و U_p انرژی پاندرماتیو لیزر است[۲-۱]. لذا پارامترهای لیزر فرودی نقش مهمی در فرآیند تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا با شدت بیشتر و فرکانس قطع بالاتری دارد که منجر به تولید تپ پرشدت آتوثانیه با پهنای زمانی بسیار کوتاه خواهد شد.

بدین منظور در این پژوهش اثر قطبش تپ لیزر فرودی به عنوان پارامتر موثر بر تولید تپ نوری آتوثانیه حاصل از فرآیند تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا از مولکول کلرین مورد بررسی قرار می‌گیرد.

روش محاسباتی

در این پژوهش، برهم‌کنش میدان پر شدت لیزری با مولکول کلرین، به کمک معادله کوهن-شم در نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان (TDDFT) بررسی شده است. این معادله در دستگاه واحد اتمی به صورت زیر می‌باشد[۳]:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi_i(r,t)=\left[-\frac{\nabla^2}{2}+v_{ks}[n](r,t)\right]\psi_i(r,t) \qquad (۱)$$

در این رابطه، $v_{KS}[n](\boldsymbol{r},t)$ و $n(\mathbf{r},t)$ به ترتیب پتانسیل کوهن-شم وابسته به زمان و چگالی الکترونی وابسته به زمان می‌باشند و با روابط زیر نمایش داده می‌شوند[۳]:

$$v_{ks}[n](r,t)=v_H[n](r,t)+v_{xc}[n](r,t)+v_{ext}(r,t)+v_{ne}(r) \qquad (۲)$$

$$n(r,t)=\sum_{i=1}^{N}\psi_i^*(r,t)\,\psi_i(r,t) \qquad (۳)$$

پتانسیل کوهن-شم وابسته به زمان شامل پتانسیل هارتری، پتانسیل تبادلی-همبستگی، پتانسیل خارجی و پتانسیل برهم کنشی الکترون و هسته می‌باشد که به دلیل ثابت بودن موقعیت هسته مستقل از زمان می باشد. در این پژوهش، از تقریب چگالی موضعی(LDA) برای پتانسیل تبادلی-همبستگی استفاده شده است.

به کمک نرم‌افزار محاسباتی اختاپوس(Octopus)، معادله کوهن-شم بر پایه نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان حل و شتاب دوقطبی سیستم بر حسب زمان به صورت زیر محاسبه می‌شود[۴]:

$$\ddot{\mathbf{d}}(t)=\langle\psi(r,t)\,|\,\ddot{\mathbf{r}}\,|\,\psi(r,t)\rangle \qquad (۴)$$

در ادامه، به کمک رابطه زیر طیف هماهنگ‌ها به دست می‌آید[۵]:

$$H(\omega)=\left|\frac{1}{T_{tot}}\int_0^{T_{tot}}\ddot{\mathbf{d}}(t)\exp(-i\,\omega t)\,dt\right|^2 \qquad (۵)$$

T_{tot} زمان کل تپ تحریک کننده سیستم اتمی-مولکولی است.

سپس از برهم نهی تعدادی از هماهنگ‌های تولید شده، تپ آتوثانیه با شدت زیر تولید می‌شود[۵]:

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]

$$I(t)=\left|\sum_{q}\mathbf{a_q}\,e^{iq\omega_0 t}\right|^2 \qquad (۶)$$

که در آن $\mathbf{a_q}$ دامنه هماهنگ در فضای فرکانس و q مرتبه هماهنگ می‌باشند.

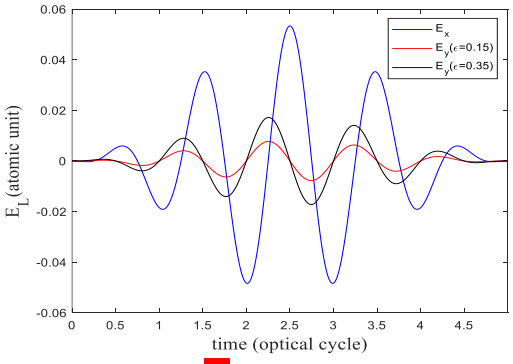
در این پژوهش، برهمکنش دو تپ قطبیده خطی و بیضوی با مولکول کلرین مورد تمرکز است که میدان مربوط به تپ قطبیده بیضوی طبق رابطه زیر توصیف می‌شود:

$$\mathbf{E_L}(t)=E_{xo}\sin^2\left(\frac{\pi t}{T_{tot}}\right)\times\left[\hat{i}\cos(\omega_0 t)+\hat{j}\,\varepsilon\sin(\omega_0 t)\right] \qquad (۷)$$

E_{xo} دامنه میدان در راستای محور x، $\hat{i}$ و $\hat{j}$ بردارهای یکه در جهت x و y و $E_{yo}=\varepsilon E_{xo}$ دامنه میدان در راستای محور y می‌باشند. پارامتر ε نیز میزان بیضوی بودن میدان را کنترل می‌کند.

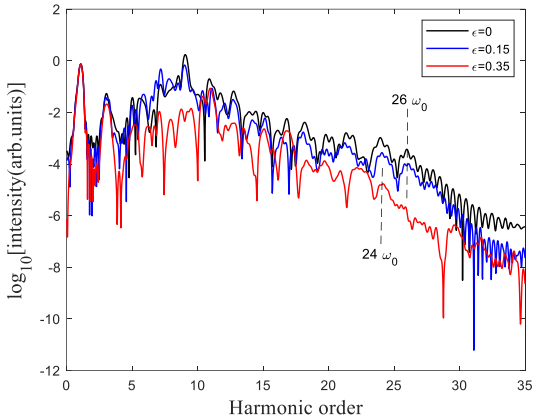
نتایج

شکل ۱ مولفه‌های میدان الکتریکی قطبیده خطی و بیضوی با پارامتر قطبش‌پذیری ۰/۱۵ و ۰/۳۵ در برهم‌کنش با مولکول کلرین برای تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا را نشان می‌دهد که شدت میدان $۱۰^{۱۴}$ W/cm^2، طول موج ۸۰۰ nm و تعداد ۵ چرخه اپتیکی درنظر گرفته شده است.



شکل ۱: مولفه‌های میدان الکتریکی تپ لیزر فرودی با طول موج ۸۰۰ nm و شدت 10^{14} W/cm^2 که نمودار آبی رنگ مربوط به میدان با قطبش خطی (ϵ= 0) و نمودار قرمز و مشکی به ترتیب مربوط به مولفه y میدان با قطبش بیضویϵ = 0.15 و ϵ = 0.35 می‌باشد. مولفه x میدان در تمامی حالت‌ها یکسان می‌باشد.

فضای شبیه سازی به شکل یک مکعب مستطیل با ابعاد ۳۵×۳۵×۹۰ در یکای واحد اتمی در نظر گرفته شده است. گام زمانی و فضایی محاسبات به ترتیب ۰/۱ و ۰/۳۵ واحد اتمی است و مولکول کلرین در راستای محور x و دقیقا در مرکز جعبه قرار دارد. با استفاده از معادله (۵)، طیف هماهنگ‌های مرتبه بالا برای سه حالت برهمکنش مولکول کلرین با میدان لیزر با قطبش خطی و بیضوی با پارامتر قطبش‌پذیری ۰/۱۵ و ۰/۳۵ حاصل شده است که در شکل ۲ نشان داده می‌شود.

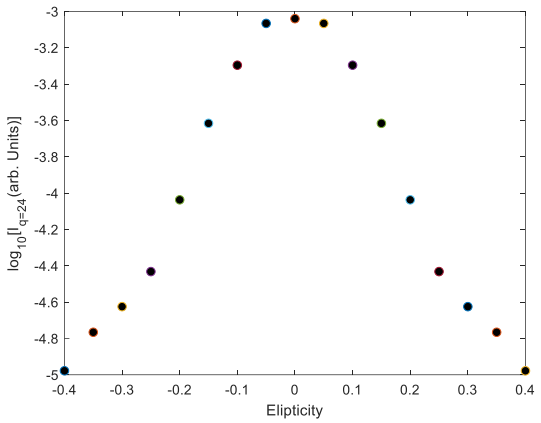


شکل ۲: طیف هماهنگ‌های مرتبه‌ی بالای حاصل از برهمکنش تپ‌های لیزری قطبیده خطی و بیضوی با مولکول کلرین.

به کمک رابطه فرکانس قطع و انرژی یونش اوربیتال Homo-2 مولکول کلرین (۱۶/۳eV)، فرکانس قطع برابر با هماهنگ مرتبه ۲۶ام محاسبه شده است که با فرکانس قطع مربوط به طیف بدست آمده برای تپ قطبیده خطی و بیضوی با پارامتر قطبش پذیری ۰/۱۵ در شکل ۲ همخوانی دارد. از شکل ۲ مشاهده می‌شود که با تغییر قطبش تپ لیزر فرودی، شدت هماهنگ‌ها تغییر محسوسی می‌کند و فرکانس قطع نیز برای تپ قطبیده بیضوی با پارامتر قطبش پذیری ۰/۳۵ دو هماهنگ کاهش می‌یابد. دلیل کاهش شدت هماهنگ‌ها این است که با افزایش پارامتر قطبش‌پذیری میزان بازترکیب بدلیل افزایش انحنای مسیر الکترون‌ها پس از یونش کاهش می‌یابد. در نتیجه با کاهش بازترکیب الکترون با یون مادر، میزان تولید هماهنگ‌ها هم

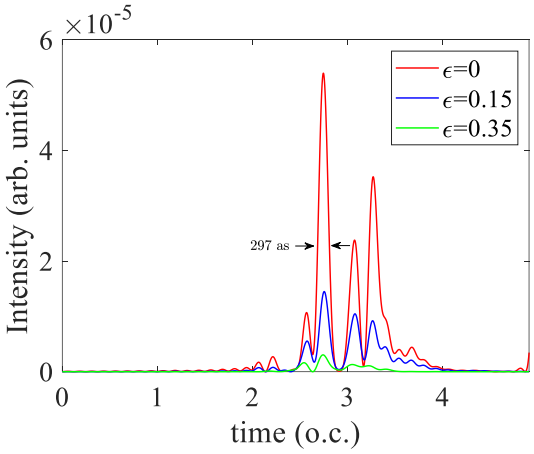
[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]

کاهش می‌یابد. جهت روشن شدن بیشتر وابستگی طیف هماهنگ‌های مرتبه بالا به قطبش تپ لیزر فرودی، تغییرات شدت یک هماهنگ خاص با فرکانس نزدیک فرکانس قطع نسبت به افزایش پارامتر قطبش‌پذیری در شکل ۳ نمایش داده شده است.



شکل ۳ : تغییرات شدت هماهنگ مرتبه ۲۴ ام نسبت به افزایش پارامتر قطبش‌پذیری.

با استفاده از معادله (۶)، تپ‌های آتوثانیه خروجی از طریق برهم نهی هماهنگ‌های مرتبه ۱۸ام تا ۲۶ام حاصل می‌شوند که نمودار شدت آنها نسبت به زمان در شکل ۴ نمایش داده شده است:



شکل ۴ : تپ‌های آتوثانیه حاصل از برهم‌نهی هماهنگ‌های مرتبه ۱۸ام تا ۲۶ام در برهمکنش مولکول کلرین با پالس‌های قطبیده خطی و بیضوی.

همان‌گونه که از شکل ۴ مشخص است، تغییرات شدت هماهنگ‌های منتج برای نور قطبیده خطی و بیضوی تاثیر بسیاری روی شدت تپ آتوثانیه خروجی گذاشته است به صورتی که شدت تپ آتوثانیه حاصل از نور قطبیده خطی تقریبا پنج برابر شدت تپ آتوثانیه حاصل از نور قطبیده بیضوی با پارامتر قطبش پذیری ۰/۳۵ است. پهنای زمانی تپ منتج از قطبش خطی ۲۹۷ آتوثانیه می‌باشد و برای قطبش‌های بیضوی این پهنا به حدود ۴۰۰ آتوثانیه می‌رسد.

نتیجه‌گیری

در این مقاله تغییرات طیف هماهنگ‌های تولید شده و تپ‌های آتوثانیه حاصل از برهمکنش تپ لیزر فمتوثانیه با میدان قطبیده خطی و بیضوی با مولکول کلرین مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که با افزایش پارامتر قطبش‌پذیری، شدت هماهنگ‌های حاصل کاهش می‌یابد و این کاهش شدت تاثیر محسوسی در شدت تپ‌های آتوثانیه خروجی دارد. علت این پدیده کاهش نرخ بازترکیب الکترون به دلیل اضافه شدن مولفه عرضی میدان الکتریکی در حالت قطبیده بیضوی است.

مرجع‌ها

[1] Lépine, F., Sansone, G. and Vrakking, M.J., 2013. Molecular applications of attosecond laser pulses. *Chemical Physics Letters*, *578*, pp.1-14.

[2] Chen, G., Su, N. Generating isolated attosecond pulse by a dual optical gating scheme. Eur. Phys. J. D 74, 202 (2020).

[3] M.Monfared, E. Irani, R. Sadighi-Bonabi, “Controlling the multi-electron dynamics in the high harmonic spectrum from N2O molecule using TDDFT”, The Journal of Chemical Physics, 148(23), 234303 (2018).

[4] M.A.L. Marques, Alberto Castro, George F. Bertsch, and Angel Rubio, octopus: a first-principles tool for excited electron-ion dynamics, Comput. Phys. Commun. 151 60-78 (2003)

[۵] محمد منفرد، الناز ایرانی، رسول صدیقی، محمدکاظم مروج‌فرشی (1399)، بررسی اثر برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی در طیف هماهنگ‌های مراتب بالا، 94، 1-10 .

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]