



## بررسی اثر برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی در طیف هماهنگ‌های مراتب بالا

محمد منفرد<sup>۱</sup>، الناز ایرانی<sup>۲\*</sup>، رسول صدیقی<sup>۱</sup>، محمد کاظم مروج‌فرشی<sup>۳</sup>

۱. دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، صندوق پستی: ۹۵۶۷-۱۱۳۶۵، تهران-ایران

۲. گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس، صندوق پستی: ۱۴۱۱۵-۱۷۵، تهران-ایران

۳. دانشکده مهندسی برق و کامپیوتر، دانشگاه تربیت مدرس، صندوق پستی: ۱۴۱۱۵-۱۹۴، تهران-ایران

### مقاله‌ی پژوهشی

تاریخ دریافت مقاله: ۹۸/۲/۱۳ تاریخ پذیرش مقاله: ۹۸/۵/۱۵

### چکیده

در این پژوهش نقش اثرات چند-الکترونی در تولید هماهنگ‌های مراتب بالا توسط برهم‌کنش لیزر فمتوثانیه با اتم آرگون و مولکول مونوکسید دی نیتروژن بررسی شده است. ابتدا اثر حضور بیش از یک الکترون در فرایند تولید هماهنگ‌ها مطالعه شده است. در این مطالعه مشاهده شد که حضور بیش از یک الکترون باعث افزایش شدت هماهنگ‌ها به‌ویژه در ناحیه فرکانس قطع می‌شود. این اثر در سیستم‌هایی که آخرین تراز پر شده آن‌ها تبهگن است، مشهودتر است. سپس اثر برهم‌کنش‌های همبستگی و تبادلی در تولید هماهنگ‌ها بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که برهم‌کنش همبستگی به تنهایی تأثیر ناچیزی در فرایند تولید هماهنگ‌ها دارد، اما تأثیر هر دو برهم‌کنش تبادلی و همبستگی در این فرایند قابل توجه است. در واقع این تأثیر قابل توجه ناشی از برهم‌کنش تبادلی است، زیرا این برهم‌کنش ۱۷٪ و ۲۳٪ از انرژی کل اتم آرگون و مولکول مونوکسید دی نیتروژن را تشکیل می‌دهد. با در نظر گرفتن برهم‌کنش تبادلی-همبستگی برای آرگون و مونوکسید دی نیتروژن، شدت هماهنگ‌ها حدود یک مرتبه بزرگی کاهش و فرکانس قطع حدود ۴-۵ مرتبه هماهنگ افزایش می‌یابد.

**کلیدواژه‌ها:** هماهنگ‌های مراتب بالا، اثرات چند-الکترونی، برهم‌کنش تبادلی-همبستگی، اتم آرگون، مولکول مونوکسید دی نیتروژن

## Studying the effect of exchange and correlation effects on high-order harmonics

M. Monfared<sup>1</sup>, E. Irani<sup>2\*</sup>, R. Sadighi<sup>1</sup>, M.K. Moravvej-Farshi<sup>3</sup>

1. Department of Physics, Sharif University of Technology, P.O. Box: 11365-9567, Tehran - Iran

2. Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, P.O.Box: 14115-175, Tehran - Iran

3. Nano Plasm-Photonic Research Group, Faculty of Electrical and Computer Engineering, Tarbiat Modares University, P.O.Box: 14115-194, Tehran, Iran

### Research Article

Received 3.5.2019, Accepted 6.8.2019

### Abstract

In this study, the role of multi-electron effects on the high harmonics generation by the interaction of femtosecond laser with Argon atom and N<sub>2</sub>O molecule has been investigated. First, the effect of multi-electron contribution to the generation of harmonics has been studied. It is observed that the presence of more than one electron leads to an increase in harmonics yield, especially in the cutoff region. This effect is more obvious in the systems in which their highest occupied level is degenerate. The effect of exchange and correlation interaction on the high harmonic generation is also investigated. The results showed that the effect of correlation interaction on harmonics is negligible, but the effect of exchange-correlation interaction is significant. Indeed, this remarkable influence is due to exchange interaction which constitutes 17% and 23% of the total energy of Argon atom and N<sub>2</sub>O molecule. By considering the exchange-correlation interaction for the argon atom and N<sub>2</sub>O, the harmonics yield decreased by one order of magnitude and the cutoff frequency increased by 4-5 harmonic order.

**Keywords:** High-order harmonics, Multi-electron effects, Exchange-correlation interaction, Argon atom, Nitrous oxide molecule

\*Email: e.irani@modares.ac.ir

## ۱. مقدمه

امروزه مطالعات نظری و تجربی زیادی در موضوع تولید هماهنگ‌های مراتب بالا<sup>۱</sup> (HHG) صورت می‌گیرد [۷-۱]. تولید هماهنگ‌های مراتب بالا کاربردهای متعددی از جمله تولید پالس‌های آتوانیه در محدوده اشعه ایکس، بررسی پدیده‌هایی که در بازه زمانی فمتوانیه و آتوانیه رخ می‌دهند، طیف‌سنجی مولکولی و تصویربرداری در ابعاد نانومتری دارد [۸-۱۳].

فیزیک هماهنگ‌های مراتب بالای تولیدشده توسط برهم‌کنش لیزر با سیستم‌های گازی توسط مدل ساده‌شده سه-گام<sup>۲</sup> (TSM) توصیف می‌شود [۱۴-۱۵]. طبق این مدل ابتدا الکترون‌های یک اتم یا مولکول تحت تأثیر میدان الکتریکی لیزر تونل‌زنی کرده و وارد فضای آزاد می‌شوند. سپس این الکترون‌ها در میدان الکتریکی لیزر شتاب گرفته و از یون مادر دور می‌شوند. با تغییر جهت میدان لیزر الکترون‌ها به سمت یون مادر برگشته و با انرژی جنبشی زیادی به آن برخورد می‌کنند و برخی از آن‌ها بازترکیب می‌شوند. الکترون بازترکیب شده انرژی جنبشی و یونش خود را به صورت یک فوتون گسیل می‌کند.

در سیستم‌های چند-الکترونی معمولاً بیش از یک الکترون یونیزه شده و در فرایند تولید هماهنگ‌ها نقش ایفا می‌کنند. حضور بیش از یک الکترون و اثرات چند-الکترونی بین آن‌ها تأثیر قابل توجهی روی شدت و فرکانس هماهنگ‌های تولیدشده دارد. این مسئله اهمیت شناخت اثرات چند-الکترونی و نقش پتانسیل‌های همبستگی و تبدالی الکترون‌ها روی هماهنگ‌های تولیدشده را دوچندان می‌کند. الکترون‌های شرکت‌کننده در فرایند تولید هماهنگ‌ها می‌توانند از یک تراز (آخرین تراز پر شده یعنی HOMO<sup>۳</sup>) یا از ترازهای مختلف سیستم یونیزه شوند. اثر حضور الکترون‌های ترازهای مختلف بر طیف هماهنگ‌ها مراتب بالا در مورد مولکول مونوکسید دی نیتروژن قبلاً بررسی شده است [۱۶]. در واقع در مقاله ذکر شده سعی شده است که با کمک گرفتن از الکترون‌های لایه‌های داخلی و چرپ کردن پالس لیزر، فرکانس قطع افزایش داده شود. در این پژوهش اثر حضور الکترون‌های یک تراز تبهگن HOMO در فرایند HHG و تأثیر برهم‌کنش‌های همبستگی و تبدالی بین آن‌ها روی طیف هماهنگ‌های تولید شده بررسی می‌شود. در واقع پارامترهای لیزر به‌گونه‌ای انتخاب شده است که الکترون‌های ترازهای داخلی‌تر (مانند HOMO-۱) یونیزه نشوند و در فرایند HHG نقشی نداشته باشند. هدف اصلی این

پژوهش درک نوع تأثیر برهم‌کنش‌های همبستگی و تبدالی بین الکترون‌های یک تراز تبهگن بر طیف هماهنگ‌های مراتب بالا است. سیستم‌های مورد مطالعه شامل اتم آرگون و مولکول مونوکسید دی نیتروژن است که هر دو دارای تراز HOMO با تبهگنی فضایی هستند. آخرین تراز پر شده اتم آرگون (۳p) دارای تبهگنی فضایی سه‌گانه و آخرین تراز پر شده مونوکسید دی نیتروژن (۲π<sub>g</sub>) دارای تبهگنی فضایی دوگانه است.

## ۲. روش محاسبات

در این پژوهش برهم‌کنش لیزر با اتم آرگون توسط معادله کوهن-شم<sup>۴</sup> (KS) مدل شده‌است. این معادله در دستگاه واحد اتمی<sup>۵</sup> (a.u.) به صورت زیر است:

(۱)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_j(r, t) = \left( -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{KS}(r, t) \right) \psi_j(r, t)$$

در رابطه فوق  $V_{KS}$  پتانسیل کوهن-شم وابسته به زمان است که به صورت زیر بیان می‌شود [۱۷]:

$$V_{KS}(r, t) = V_{nn} + V_{ne}(r) + V_H(r, t) + V_{xc}(r, t) + V_{ext}(r, t), \quad (2)$$

پتانسیل‌های سمت راست تساوی به ترتیب پتانسیل کولمبی بین هسته‌ها، کولمبی بین هسته و الکترون‌ها، پتانسیل هارتزی، پتانسیل تبدالی-همبستگی و پتانسیل خارجی ناشی از میدان لیزر می‌باشند. پتانسیل کولمبی بین هسته با توجه به ثابت فرض شدن موقعیت هسته‌ها، دارای مقداری ثابت است و تابع مکان و زمان نیست. در پژوهش حاضر، پتانسیل کولمبی هسته با استفاده از شبه-پتانسیل تقریب زده شده است [۱۸]. در واقع اثر پتانسیل هسته به همراه اثر پوششی الکترون‌های لایه‌های داخلی‌تر توسط یک پتانسیل مؤثر (شبه-پتانسیل) بیان شده است. در مورد سیستم‌های مورد مطالعه در این پژوهش (Ar و N<sub>2</sub>O) به جز ۸ الکترون ترازهای بالاتر، اثر پوششی بقیه الکترون‌ها در شبه-پتانسیل لحاظ شده است. پتانسیل تبدالی-همبستگی مورد استفاده در این پژوهش، پتانسیل مربوط به تقریب چگالی موضعی تعمیم یافته (LDA-mod) است [۱۹]. این پتانسیل به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$E_{xc}^{LDA} [n] = \int d^3r n(r) \varepsilon_{xc}^{unif}(n(r)), \quad (3)$$

4. Kohn-Sham  
5. Atomic Unit

1. High Harmonics Generation  
2. Three-Step Model  
3. Highest Occupied Molecular Orbital

هم‌چنین شکل پالس آتوتائیه خروجی در فضای زمان نیز به کمک رابطه زیر محاسبه می‌شود [۲۳]:

$$I(t) = \left| \sum_q a_q \exp(iq\omega_0 t) \right|^2, \quad (9)$$

که  $I(t)$  شدت پالس خروجی در فضای زمان است. به کمک رابطه فوق می‌توان پهنای زمانی پالس آتوتائیه خروجی را به دست آورد.

هم‌چنین طبق مدل سه-گام می‌توان بالاترین فرکانس تولیدی (فرکانس قطع) را نیز توسط رابطه زیر پیش‌بینی کرد [۱۵]:

$$\omega_{max} = 1.3 I_p + K_{max} \quad (8)$$

در رابطه فوق  $I_p$  انرژی یونش اتم یا مولکول و  $K_{max}$  بیشینه انرژی جنبشی الکترون هنگام بازترکیب است. می‌توان نشان داد بیشینه انرژی جنبشی الکترون هنگام بازترکیب برابر  $U_p$  [۳، ۱۷] است که  $U_p$  انرژی پاندرماتیو لیزر است.

### ۳. نتایج

جعبه شبیه‌سازی به صورت یک مکعب مستطیل با ارتفاع ۳۰۰ واحد اتمی و سطح مقطعی با ابعاد  $100 \times 100$  با یکای واحد اتمی در نظر گرفته شد. موقعیت اتم یا مولکول مورد نظر در وسط جعبه فرض شده است. جهت‌گیری مولکول  $N_2O$  طوری در نظر گرفته شده است که همه اتم‌های آن روی محور  $x$  (هم‌راستا با جهت قطبش لیزر) قرار بگیرند. گام محاسباتی در فضای حقیقی برابر  $0.3$  واحد اتمی و گام‌های زمانی عملگر انتشارگر زمانی در برنامه اختاپوس برابر  $0.05$  واحد اتمی در نظر گرفته شد.

قبل از بررسی اثر برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی، ابتدا نتایج حاصل از محاسبات راستی آزمایی شده‌اند. بدین منظور طیف هم‌هنگ‌های اتم آرگون و مولکول مونوکسید دی‌نیتروژن، مطابق شرایط ارائه شده در پژوهش‌های تجربی صورت گرفته [۲۴، ۲۵] محاسبه شده‌اند. در شکل ۱ طیف هم‌هنگ‌های ثبت شده به صورت تجربی و هم‌چنین نتایج شبیه‌سازی حاصل از این پژوهش رسم شده‌اند.

همان‌طور که در شکل ۱ الف مشاهده می‌شود، طیف هم‌هنگ‌های اتم آرگون دارای یک کمینه در بازه انرژی ۵۰ الی ۶۰ الی الکترون ولت است که در شکل ۱ ب نیز این کمینه مشاهده می‌شود. هم‌چنین فرکانس قطع مشاهده شده طبق نتایج تجربی در انرژی ۷۲ eV واقع شده است که نتایج شبیه‌سازی در شکل ۱ ب نیز، فرکانس قطع را در انرژی

که  $\mathcal{E}_{xc}^{unif}$  انرژی تبادلی-همبستگی به ازای واحد ذره برای گاز الکترونی یکنواخت [۱۷] و  $n(r)$  چگالی الکترونی سیستم است که به صورت زیر قابل محاسبه است:

$$n(r) = \sum_j |\psi_j(r)|^2. \quad (4)$$

میدان الکتريکی لیزر با قطبش خطی در راستای  $x$  مطابق رابطه زیر فرض شده است:

$$E_L(t) = \hat{x} \left[ E_0 \sin^r \left( \frac{\pi t}{T_{tot}} \right) \right] \sin(\omega_0 t), \quad (5)$$

که  $x$  جهت قطبش،  $E_0$  دامنه میدان الکتريکی،  $\omega_0$  فرکانس زاویه‌ای مرکزی پالس لیزر و  $T_{tot}$  زمان کل پالس است. جهت محاسبه هم‌هنگ‌های مراتب بالای تولیدشده، ابتدا معادله KS به روش نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان (TDDFT) توسط نرم‌افزار محاسباتی اختاپوس [۲۰] حل شده و شتاب دوقطبی سیستم  $d$  برحسب زمان مطابق رابطه زیر محاسبه شده است:

$$\ddot{d}(t) = \langle \Psi(r,t) | \ddot{r} | \Psi(r,t) \rangle. \quad (6)$$

سپس به کمک رابطه زیر طیف هم‌هنگ‌ها به دست آمده است [۲۱]:

$$H(q) = |a_q|^r, \quad a_q = \frac{1}{T_{tot}} \int_0^{T_{tot}} \ddot{d}(t) \exp(-iq\omega_0 t) dt, \quad (7)$$

که  $q$  مرتبه هم‌هنگ تولید شده طی فرایند HHG،  $H(q)$  شدت آن در فضای فرکانس و  $T_{tot}$  زمان کل دوام پالس است. هم‌چنین جهت تحلیل جزئی‌تر فرایند HHG نمایه زمان-فرکانس مطابق رابطه زیر محاسبه می‌شود [۲۲]:

$$A(t, q) = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \ddot{d}(t') \exp(-iq\omega_0 t') \exp\left(\frac{(t'-t)^2}{2\sigma^2}\right) dt' \right|^2, \quad (8)$$

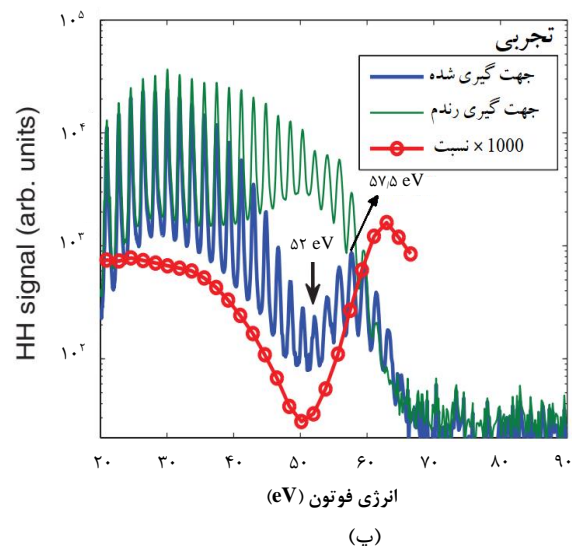
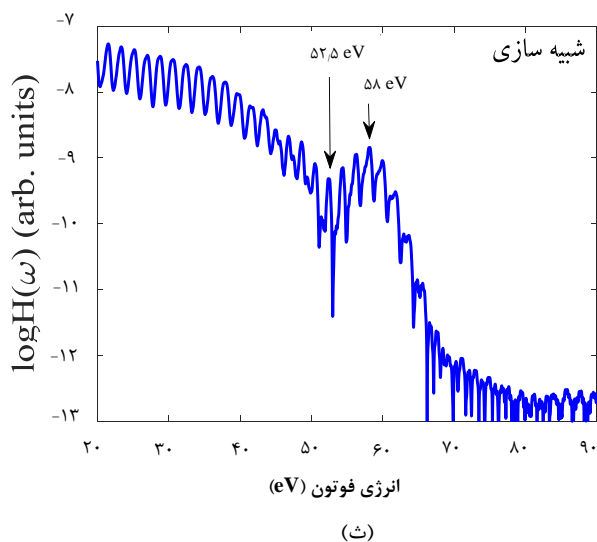
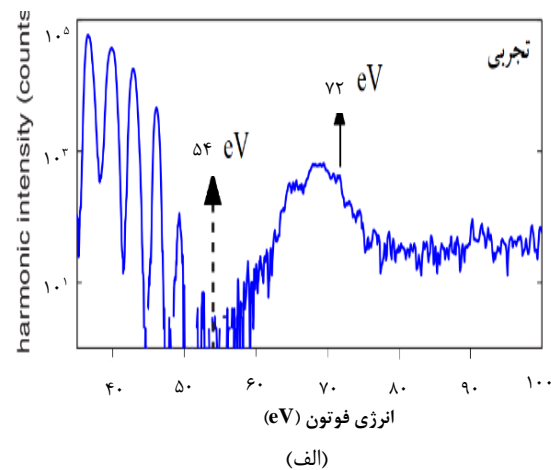
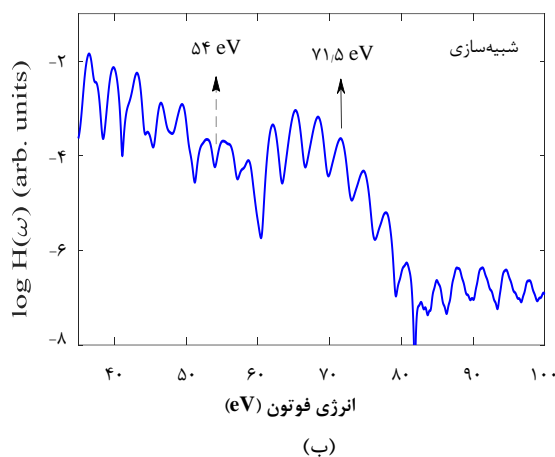
کمیت  $A(t, q)$  شدت گسیل فوتونی با فرکانس  $\omega = q\omega_0$  را در لحظه  $t$  نمایش می‌دهد.  $\sigma$  پهنای پنجره گاوسی است. با بررسی این کمیت می‌توان دریافت چه هم‌هنگ‌هایی و در چه لحظاتی گسیل شده‌اند.

1. Time- Dependent Density Functional Theory
2. Octopus

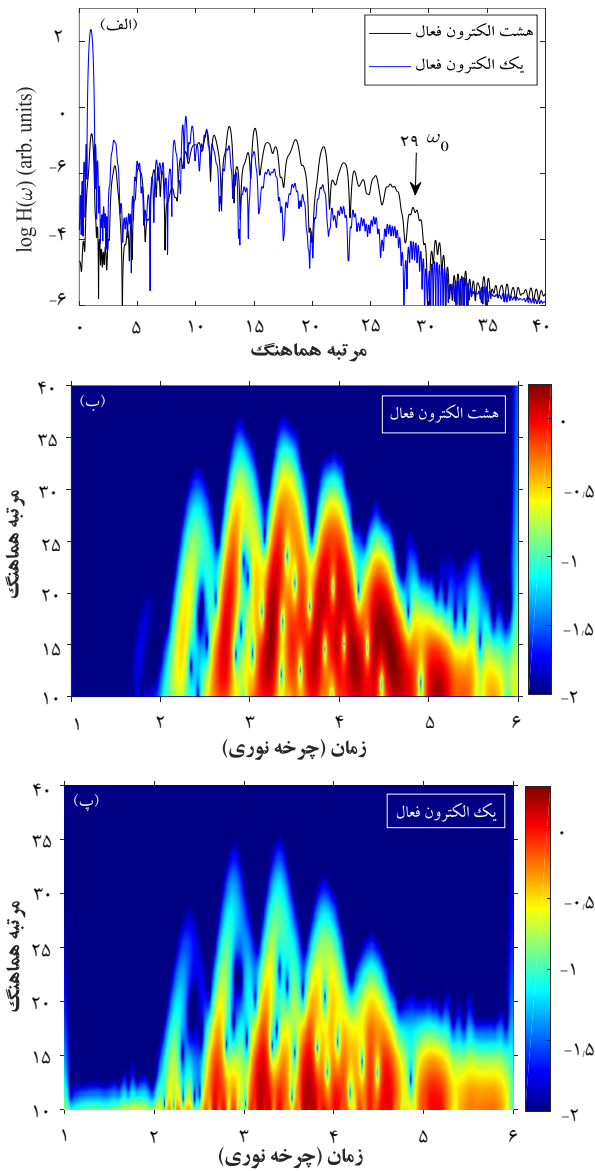
مراتب بالا، پارامترهای لیزر به گونه‌ای انتخاب شده است که حجم و زمان محاسبات کمینه شود. لیزر مورد استفاده در بخش‌های بعدی این پژوهش دارای طول موج مرکزی ۷۰۰ نانومتر، شدت بیشینه ۰/۲ پتاوات بر سانتی‌متر مربع و شش چرخه نوری است. با توجه به این پارامترها، فرکانس قطع سیستم‌های مورد بررسی کاهش یافته و لذا محل کمینه‌ها پس از فرکانس قطع خواهد بود. در نتیجه انتظار ظاهر شدن این کمینه‌ها را در طیف هماهنگ‌های مراتب بالا نخواهیم داشت. در ادامه ابتدا اثرات چند الکترونی و سپس اثر برهم‌کنش‌های تبدالی و همبستگی بر طیف هماهنگ‌های آرگون بررسی می‌شود. در نهایت نیز همین اثرات در طیف هماهنگ‌های مولکول  $N_2O$  مطالعه و با نتایج مربوط به آرگون مقایسه شده است.

۷۱/۵ eV نشان می‌دهد. طیف هماهنگ‌های تجربی مولکول مونوکسید دی‌نیتروژن نیز در شکل ۱ پ دارای کمینه‌ای در انرژی ۵۲ eV و فرکانس قطعی در انرژی ۵۷/۵ eV است. نتایج محاسبات این پژوهش این دو کمیت را برای مولکول مونوکسید دی‌نیتروژن برابر ۵۲/۵ و ۵۸ الکترون ولت پیش‌بینی می‌کند. تطابق قابل قبولی که بین نتایج سازی شده در پژوهش حاضر و معادل تجربی آن‌ها در شکل ۱ مشاهده می‌شود، تأییدی بر صحت، دقت کافی و قابل اطمینان بودن نتایج محاسبات پژوهش حاضر است.

از آنجایی که شبیه‌سازی مربوط به نتایج شکل ۱ با توجه به پارامترهای لیزر مورد استفاده، دارای حجم محاسبات بالا و زمان نسبتاً طولانی است، لذا در ادامه جهت بررسی اثر برهم‌کنش‌های تبدالی و همبستگی در طیف هماهنگ‌های



شکل ۱. الف) طیف هماهنگ‌های تولید شده از برهم‌کنش لیزر با اتم آرگون به صورت تجربی [۲۴]. طول موج لیزر ۷۸۰ نانومتر و شدت آن ۰/۲۵ پتاوات بر سانتی‌متر مربع بوده است. ب) طیف هماهنگ‌های شبیه‌سازی شده از برهم‌کنش لیزر با مشخصات قسمت الف) با اتم آرگون. پ) طیف هماهنگ‌های تولید شده از برهم‌کنش لیزر با مولکول مونوکسید دی‌نیتروژن به صورت تجربی [۲۵]. نمودارهای آبی و سبز رنگ به ترتیب مربوط به حالت‌هایی است که مولکول‌ها دارای جهت‌گیری منظم و تصادفی نسبت به راستای قطبش لیزر است. نمودار قرمز رنگ نیز نسبت دو حالت ذکر شده است. طول موج لیزر ۱۳۶۰ نانومتر و شدت آن ۸۲ تراوات بر سانتی‌متر مربع بوده است. ت) طیف هماهنگ‌های شبیه‌سازی شده از برهم‌کنش لیزر با مشخصات قسمت پ) با مولکول مونوکسید دی‌نیتروژن.



شکل ۲. الف) طیف هماهنگ‌های تولید شده در مدل هشت- الکترونی (طیف مشکی) و تک- الکترونی (طیف آبی). ب) نمایه زمان- فرکانس مربوط به مدل هشت- الکترونی. پ) نمایه زمان- فرکانس مربوط به مدل تک- الکترونی.

۲.۳ بررسی برهم‌کنش همبستگی در طیف هماهنگ‌های آرگون در این بخش اثر برهم‌کنش همبستگی روی فرایند HHG بررسی شده است. جهت انجام این بررسی مدل هشت- الکترونی یک بار با فرض فعال بودن همه برهم‌کنش‌ها و بار دیگر با فرض غیرفعال بودن برهم‌کنش همبستگی حل شده است. طیف هماهنگ‌های تولید شده توسط برهم‌کنش لیزر با اتم آرگون در دو حالت حضور و عدم حضور برهم‌کنش همبستگی در شکل ۳ الف نمایش داده شده است. نمودار مشکی رنگ مربوط به حالتی است که همه برهم‌کنش‌ها مفروض شده‌اند و نمودار سبز رنگ مربوط به حالتی است که برهم‌کنش همبستگی نادیده گرفته شده است.

۱.۳ بررسی اثرات چند- الکترونی در طیف هماهنگ‌های آرگون در این بخش طیف هماهنگ‌های مراتب بالای تولیدی توسط برهم‌کنش لیزر با اتم آرگون در دو حالت مختلف محاسبه و مقایسه می‌شوند. حالت اول با فرض فعال بودن هشت الکترون لایه ظرفیت و حالت دوم با فرض فعال بودن یک الکترون از آخرین لایه پر شده است. در واقع فرض شده است الکترون‌های غیرفعال، برهم‌کنشی با لیزر نخواهند داشت، ولی برهم‌کنش آن‌ها با الکترون‌های فعال لحاظ شده است.

هماهنگ‌های تولیدی این دو حالت در شکل ۲ الف نشان داده شده است. نمودار مشکی رنگ مربوط به مدل هشت- الکترونی و نمودار آبی رنگ مربوط به مدل تک- الکترونی است. همان‌طور که مشاهده می‌شود طیف هماهنگ‌های مربوط به مدل هشت- الکترونی (به ویژه در محدوده هماهنگ‌های بالاتر از ۱۲) دارای شدت بالاتری هستند. دلیل این اختلاف شدت این است که در حالت هشت- الکترونی هر شش الکترون تبهگن موجود در لایه ۳p اتم آرگون در تولید هماهنگ‌ها نقش مؤثری دارند، در حالی که در حالت تک- الکترونی تنها یک الکترون در فرایند HHG شرکت می‌کند. فرکانس قطع پیش‌بینی شده توسط مدل سه- گام (رابطه ۸) معادل هماهنگ ۲۸- ام است و فرکانس قطع طیف‌های شکل ۲ الف نیز در تطابق خوبی با این پیش‌بینی است.

در شکل ۲ ب و پ نمایه زمان- فرکانس مربوط به هر یک از مدل‌های هشت- الکترونی و تک- الکترونی رسم شده است. مشاهده می‌شود که مدل هشت- الکترونی، هماهنگ‌های به مراتب پر شدت‌تری تولید کرده است. هم‌چنین مشاهده می‌شود که در دو چرخه نوری<sup>۱</sup> (O.C.) اول هیچ بازترکیبی رخ نداده است. در واقع به دلیل کم بودن دامنه میدان الکتریکی در ابتدای پالس میزان یونش بسیار ناچیز است و بازترکیبی نیز مشاهده نخواهد شد.

هم‌چنین در نمایه‌های زمان- فرکانس مشاهده می‌شود که تا انتهای چرخه چهارم نقش الکترون‌های مسیر کوتاه بسیار غالب تر از الکترون‌های مسیر بلند است. از پنجم به بعد، هر دو نوع از الکترون‌ها نقش یکسانی در فرایند HHG دارند. علاوه بر آن از چرخه پنجم به بعد شاهد اثرات تداخلی بین الکترون‌ها هستیم. این تداخل‌ها بین الکترون‌های یونیزه شده در زمان‌های مختلف رخ می‌دهد. در ادامه اثر برهم‌کنش‌های همبستگی و تبادلی بین الکترون‌ها در مدل هشت- الکترونی روی طیف هماهنگ‌های تولیدی بررسی خواهد شد.

1. Optical Cycle



هم‌چنین مشاهده می‌شود که فرکانس قطع در حالت غیرفعال بودن برهم‌کنش همبستگی کاهش یافته است که با توجه به رابطه (۸) توجیه‌پذیر است. در شکل ۳ ب و ۳ پ نمایه زمان-فرکانس مربوط به هر یک از حالت‌های فعال و غیرفعال بودن برهم‌کنش همبستگی رسم شده است. افزایش نسبی شدت هماهنگ‌های تولیدی در حالت غیرفعال بودن برهم‌کنش همبستگی کاملاً مشهود است.

جدول ۱ سهم‌های مختلف انرژی را برای اتم آرگون نشان می‌دهد. انرژی یونش در هر حالت برابر اختلاف انرژی کل اتم آرگون و یون آن در نظر گرفته شده است. انرژی همبستگی حدود ۲ درصد انرژی کل را تشکیل می‌دهد.

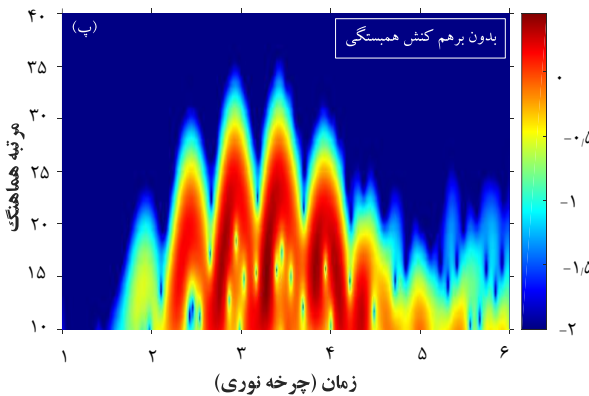
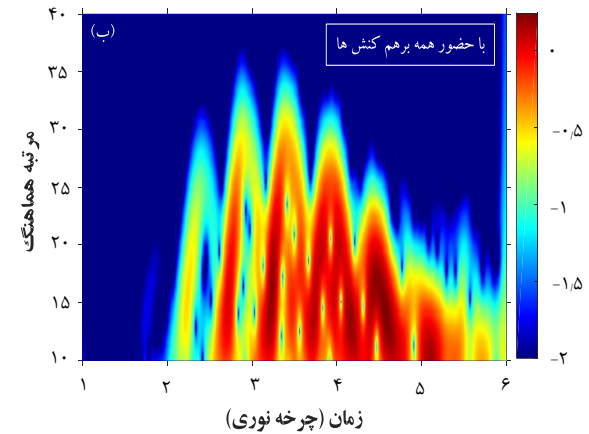
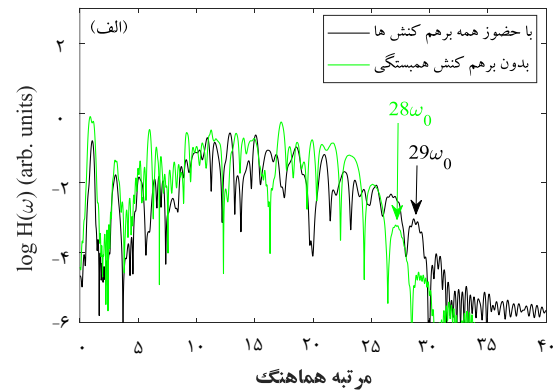
مشاهده می‌شود که با غیرفعال شدن برهم‌کنش همبستگی، انرژی یونش سیستم به اندازه ۱٫۳۶ eV کاهش یافته است. کاهش انرژی یونش از طرفی باعث کاهش فرکانس قطع و از طرف دیگر سبب افزایش میزان یونش و افزایش شدت هماهنگ‌ها شده است (شکل ۳). کاهش انرژی یونش در این حالت حدوداً برابر انرژی یک فوتون لیزر است ( $\Delta I_p \approx \omega_0$ ) و در نتیجه فرکانس قطع نیز حدود از هماهنگ ۲۹- ام به هماهنگ ۲۸- ام تقلیل پیدا کرده است (شکل ۳).

### ۳.۳ بررسی اثر برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی در طیف هماهنگ‌های آرگون

در این بخش اثر برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی روی فرایند HHG بررسی شده است. در واقع مدل هشت-الکترونی یک بار با فرض فعال بودن همه برهم‌کنش‌ها و بار دیگر با فرض غیرفعال بودن هر دو برهم‌کنش تبادلی و همبستگی حل شده است.

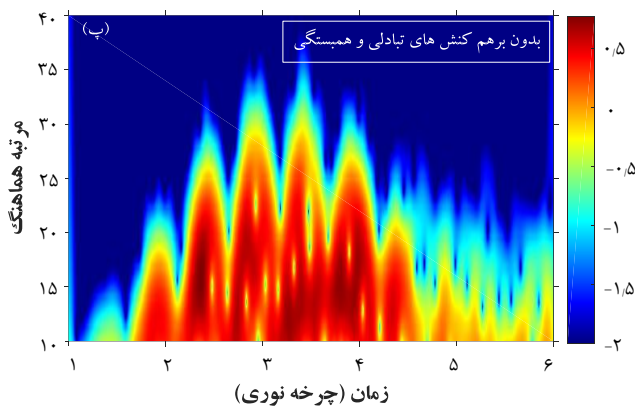
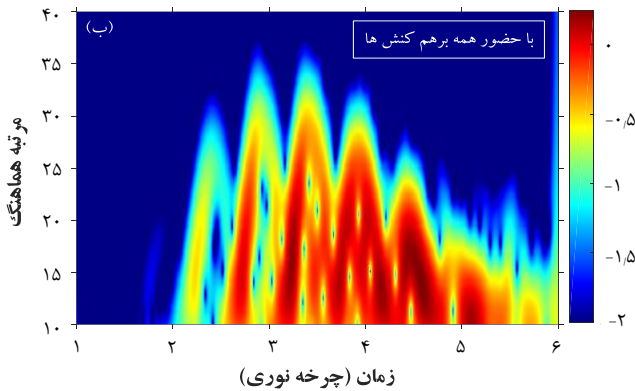
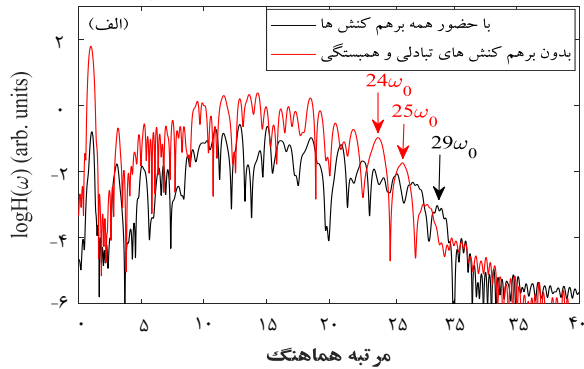
جدول ۱، سهم‌های مختلف انرژی اتم آرگون در حالت پایه آن به ازای فعال و غیرفعال بودن برهم‌کنش همبستگی. همه مقادیر با واحد eV هستند.

| با حضور همه برهم‌کنش‌ها |          | بدون برهم‌کنش همبستگی |  |
|-------------------------|----------|-----------------------|--|
| $E_{kinetic}$           | ۲۱۸٫۴۷   | ۲۱۱٫۹۰                |  |
| $V_{nn}$                | ۰        | ۰                     |  |
| $V_{ne}$                | -۱۱۹۱٫۹۵ | -۱۱۷۷٫۸۶              |  |
| $V_H$                   | ۴۹۸٫۳۹   | ۴۸۹٫۰۷                |  |
| $V_x$                   | -۸۵٫۹۲   | -۸۴٫۲۹                |  |
| $V_c$                   | -۱۱٫۹۵   | ۰                     |  |
| $E_{total}$             | -۵۷۲٫۹۶  | -۵۶۱٫۱۹               |  |
| $I_p$                   | ۱۶٫۱۳    | ۱۴٫۷۷                 |  |



شکل ۳. الف) طیف هماهنگ‌های تولید شده با حضور همه برهم‌کنش‌ها (طیف مشکی) و بدون حضور برهم‌کنش همبستگی (طیف سبز). ب) نمایه زمان-فرکانس با فرض حضور همه برهم‌کنش‌ها. پ) نمایه زمان-فرکانس با فرض عدم حضور برهم‌کنش همبستگی.

مشاهده می‌شود که با حذف برهم‌کنش همبستگی بین الکترون‌ها، شدت هماهنگ‌ها اندکی افزایش یافته است. این افزایش شدت به دلیل کاهش انرژی یونش آرگون در حالت غیرفعال بودن برهم‌کنش همبستگی است (جدول ۱). در واقع با حذف پتانسیل همبستگی انرژی یونش آرگون کاهش و احتمال یونیزه شدن الکترون‌ها افزایش می‌یابد. با افزایش چگالی بسته موج الکترونی یونیزه شده، بازترکیب قوی‌تری رخ خواهد داد. در ادامه در جدول ۱ نحوه تغییرات انرژی کل و انرژی یونش آرگون با دقت بیش‌تری بررسی خواهد شد.



شکل ۴. الف) طیف هماهنگ‌های تولید شده با حضور همه برهم‌کنش‌ها (طیف مشکی) و بدون حضور برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی (طیف قرمز). ب) نمایه زمان-فرکانس با فرض حضور همه برهم‌کنش‌ها. پ) نمایه زمان-فرکانس با فرض عدم حضور برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی.

جدول ۲. سهم‌های مختلف انرژی اتم آرگون در حالت پایه آن به ازای فعال و غیرفعال بودن برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی. همه مقادیر با واحد eV هستند.

با حضور همه برهم‌کنش‌ها بدون برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی

|          |          |               |
|----------|----------|---------------|
| ۱۷۷,۳۲   | ۲۱۸,۴۷   | $E_{kinetic}$ |
| ۰        | ۰        | $V_{im}$      |
| -۱۰۹۵,۷۶ | -۱۱۹۱,۹۵ | $V_{ne}$      |
| ۴۳۷,۱۱   | ۴۹۸,۳۹   | $V_H$         |
| ۰        | -۸۵,۹۲   | $V_x$         |
| ۰        | -۱۱,۹۵   | $V_c$         |
| -۴۸۱,۳۳  | -۵۷۲,۹۶  | $E_{total}$   |
| ۶,۸۱     | ۱۶,۱۳    | $I_p$         |

طیف هماهنگ‌های تولید شده در دو حالت ذکر شده در شکل ۴ الف نمایش داده شده است. نمودار مشکی رنگ مربوط به حالتی است که همه برهم‌کنش‌ها مفروض شده‌اند و نمودار قرمز رنگ مربوط به حالتی است که برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی غیرفعال هستند. مشاهده می‌شود که با حذف برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی بین الکترون‌ها، شدت هماهنگ‌ها به‌طور قابل توجهی افزایش یافته‌است. این افزایش شدت به دلیل کاهش چشمگیر انرژی یونش آرگون در حالت غیرفعال بودن برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی است (جدول ۲). همچنین مشاهده می‌شود که فرکانس قطع در حالت غیرفعال بودن برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی از هماهنگ ۲۹-ام به هماهنگ ۲۴-ام (یا ۲۵-ام) کاهش یافته است که به دلیل کاهش انرژی یونش آرگون است (جدول ۲). نمایه زمان-فرکانس مربوط به هر یک از حالت‌های فعال و غیرفعال بودن برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی در شکل ۴ ب و پ رسم شده است. شکل ۴ پ افزایش شدت هماهنگ‌های تولیدی در حالت غیرفعال بودن برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی را تأیید می‌کند. همچنین مشاهده می‌شود که با غیرفعال شدن برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی، فرایند HHG یک چرخه زودتر (در زمان  $t=1/5$  O.C.) شروع می‌شود. در واقع با غیرفعال شدن برهم‌کنش‌ها انرژی یونش کاهش قابل توجهی یافته و الکترون‌ها حتی در چرخه دوم که دامنه میدان الکتریکی ضعیف‌تری دارد نیز یونیزه می‌شوند. در ادامه در جدول ۲ سهم‌های مختلف انرژی را برای اتم آرگون نشان داده شده است.

همان‌طور که در جدول ۲ مشاهده می‌شود، انرژی تبادلی و همبستگی جمعاً حدود ۱۷ درصد انرژی کل را تشکیل می‌دهند. در نتیجه حذف این برهم‌کنش‌ها تأثیر قابل توجهی در مقدار انرژی یونش دارد. با غیرفعال شدن برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی، انرژی یونش سیستم به اندازه ۹,۳ eV یعنی بیش از ۵۰ درصد کاهش یافته است. این کاهش قابل توجه انرژی یونش، افزایش شدت هماهنگ‌ها در شکل ۴ الف را به خوبی تفسیر می‌کند. کاهش انرژی یونش حدوداً معادل انرژی ۵ فوتون لیزر است ( $AI_p \approx 5 \omega_0$ )، لذا کاهش فرکانس قطع را از هماهنگ ۲۹-ام به هماهنگ ۲۴-ام (یا ۲۵-ام) در شکل ۳ به خوبی توجیه می‌کند.

فرکانس قطع با مقدار مشاهده شده آن در شبیه‌سازی این است که مکان تونل زنی و بازترکیب بسته موج الکترونی جدا شده از تراز HOMO دقیقاً یکسان نیست [۲۶]، در حالی که در مدل سه-گام و اثبات رابطه (۸) فرض شده است جابه‌جایی الکترون طی فرایند یونش تا بازترکیب صفر است. در واقع بسته موج الکترونی که در مکان  $x_1$  تونل می‌زند، پس از بازگشت ممکن است از موقعیت  $x_1$  عبور کرده و در طرف دیگر مولکول با اوربیتال HOMO برهم‌کنش کرده و بازترکیب شود. مسافت اضافه‌تری که این بسته موج طی می‌کند سبب افزایش انرژی جنبشی بسته موج شده و در نتیجه پس از بازترکیب فوتونی با انرژی بیش‌تر گسیل می‌کند. این افزایش انرژی برابر کار نیروی «میدان لیزر در لحظه بازترکیب»  $E_L(t_{rec})$  روی بسته موج الکترونی است که مسافت  $R$  را اضافه‌تر طی می‌کند، مقدار  $W \approx E_L(t_{rec}) \cdot R$  بیشینه برابر فاصله دو سر مولکول است. این انرژی اضافه می‌تواند تا حدود ۵ eV یعنی معادل ۳ شماره هماهنگ (با طول موج ۷۰۰ نانومتر) فرکانس قطع را افزایش دهد [۲۶].

شکل ۵ ب طیف هماهنگ‌های تولید شده توسط برهم‌کنش لیزر با مولکول مونوکسید دی‌نیتروژن در حالت‌های حضور و عدم حضور برهم‌کنش همبستگی را نمایش می‌دهد. نمودار مشکی رنگ مربوط به حالتی است که همه برهم‌کنش‌ها لحاظ شده‌اند و نمودار سبز رنگ مربوط به حالتی است که برهم‌کنش همبستگی نادیده گرفته شده‌است. مشاهده می‌شود که با حذف برهم‌کنش همبستگی در محاسبات، شدت هماهنگ‌ها اندکی افزایش یافته‌است. این نتیجه به دلیل کاهش انرژی یونش مولکول و افزایش اندک نرخ یونش آن در حالت غیرفعال بودن برهم‌کنش همبستگی است (جدول ۳). همچنین مشاهده می‌شود که فرکانس قطع حدود یک مرتبه هماهنگ کاهش یافته‌است که ناشی از کاهش انرژی یونش مولکول است. انرژی یونش مولکول به اندازه ۱٫۵۳ eV کاهش یافته‌است (جدول ۳) که حدوداً معادل انرژی یک فوتون لیزر است ( $\Delta I_p \approx \omega_l$ ). از طرف دیگر، کاهش انرژی یونش در حالت غیرفعال بودن برهم‌کنش همبستگی سبب افزایش میزان یونش و افزایش اندک شدت هماهنگ‌ها در فضای فرکانس شده‌است که در شکل ۴ ب مشاهده می‌شود.

۴.۳ بررسی اثر برهم‌کنش‌های چند الکترونی در طیف هماهنگ‌های مولکول مونوکسید دی‌نیتروژن

در این بخش اثر برهم‌کنش‌های چند الکترونی در طیف هماهنگ‌های مراتب بالای مولکول مونوکسید دی‌نیتروژن بررسی می‌شود. ابتدا اثر حضور بیش از یک الکترون و سپس اثر برهم‌کنش‌های تبادلی و همبستگی در طیف هماهنگ‌ها مطالعه می‌شود. طیف هماهنگ‌های مراتب بالای مولکول مونوکسید دی‌نیتروژن در اثر تابش لیزر در شکل ۵ رسم شده‌است. شکل ۵ الف طیف هماهنگ‌ها را در دو حالت نشان می‌دهد. حالت اول با فرض فعال بودن هشت الکترون ظرفیت مولکول بوده و به رنگ مشکی نمایش داده شده‌است. حالت دوم با فرض فعال بودن تنها یک الکترون از آخرین لایه پر شده مولکول است که با رنگ آبی مشخص شده‌است. مشاهده می‌شود که طیف هماهنگ‌های در بازه‌های مختلف فرکانسی رفتار مختلفی نسبت به یک‌دیگر دارند. در محدوده هماهنگ‌های پایین‌تر (کم‌تر از  $7\omega_0$ ) طیف مربوط به مدل تک الکترون فعال دارای شدت بالاتری نسبت به مدل هست الکترون فعال است. این ناحیه مربوط الکترون‌هایی است که برانگیخته می‌شوند و با برگشت به حالت پایه و گسیل چند فوتونی هماهنگ‌هایی را تولید می‌کنند.

با توجه به این‌که در حالت هشت الکترون فعال جمعیت الکترون‌های برانگیخته بیش‌تر می‌شود، انتظار می‌رود شدت گسیل‌های چند فوتونی در این حالت بیش‌تر باشد. در نتیجه می‌توان گفت بین فوتون‌های گسیل شده هم انرژی، تداخل و برانگیز صورت گرفته و شدت آن‌ها کاهش یافته‌است. هماهنگ‌های بالاتر از ۷ که ناشی از فرایند HHG هستند در مدل هشت الکترون فعال دارای شدت بالاتری هستند. دلیل این امر تبهگنی دوگانه تراز آخر مولکول مونوکسید دی‌نیتروژن ( $2\pi_g$ ) و مشارکت چهار الکترون آن در فرایند HHG است. در حالی که در حالت تک الکترون فعال تنها یک الکترون از تراز آخر در فرایند HHG شرکت می‌کند.

شایان ذکر است که طیف دو مدل تک-الکترونی و هشت-الکترونی در مولکول مونوکسید دی‌نیتروژن به نسبت اتم آرگون دارای اختلاف شدت کم‌تری هستند، زیرا تبهگنی آخرین تراز پر شده مولکول مونوکسید دی‌نیتروژن کم‌تر است. فرکانس قطع پیش‌بینی شده مولکول مونوکسید دی‌نیتروژن توسط مدل سه-گام برابر هماهنگ ۲۷-ام است که با فرکانس قطع مشاهده شده در شکل ۵ الف (هماهنگ ۲۹-ام) در تطابق قابل قبولی است. دلیل اختلاف اندک مقدار پیش‌بینی شده



| $I_p$ | ۱۲,۸۱ | ۱۱,۲۸ | ۵,۵۴ |
|-------|-------|-------|------|
|-------|-------|-------|------|

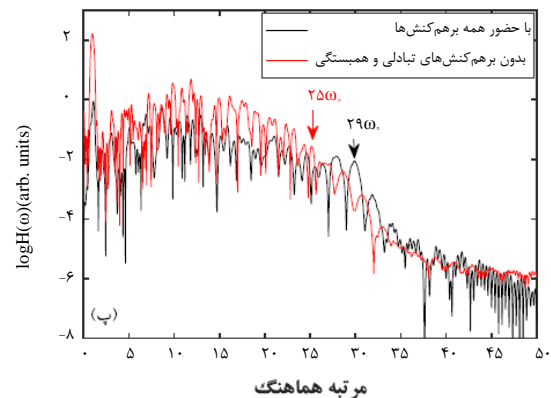
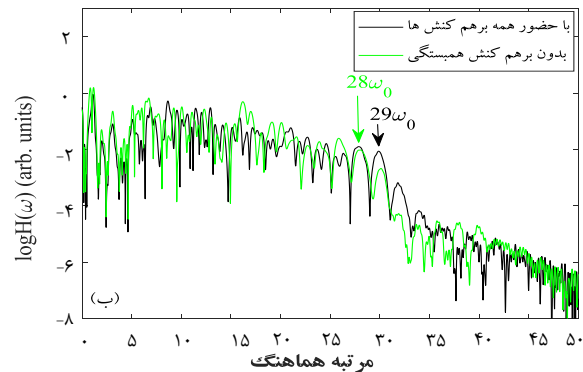
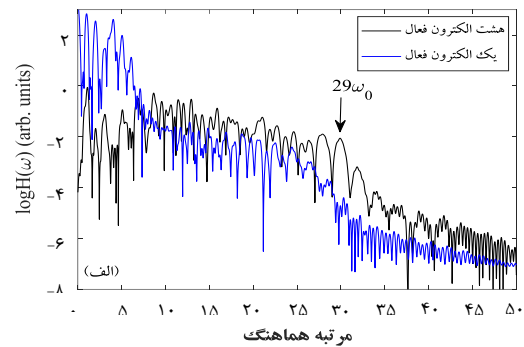
در شکل ۵ پ اثر هر دو برهم کنش تبدالی و همبستگی به طور هم‌زمان روی طیف هماهنگ‌های تولید شده مطالعه شده است. نمودار مشکی رنگ مربوط به حالتی است که همه برهم‌کنش‌ها مفروض هستند و نمودار قرمز رنگ مربوط به حالتی است که برهم‌کنش‌های تبدالی و همبستگی غیرفعال هستند. این بار نیز مشاهده می‌شود که با حذف برهم‌کنش‌های تبدالی و همبستگی بین الکترون‌ها، شدت هماهنگ‌ها به اندازه یک مرتبه بزرگی افزایش یافته‌است. همان‌طور که در بخش اتم آرگون نیز توضیح داده شد، افزایش شدت هماهنگ‌ها به دلیل کاهش انرژی یونش مولکول در حالت غیرفعال بودن برهم‌کنش‌های تبدالی و همبستگی است. از آنجایی که کاهش انرژی یونش در این حالت  $(7.27 \text{ eV})$ ، بیش‌تر از حالت غیرفعال بودن برهم‌کنش همبستگی است، لذا میزان یونش افزایش قابل توجه‌تری داشته و اثر آن در افزایش شدت هماهنگ‌ها مشهودتر است (شکل ۵ پ). هم‌چنین مشاهده می‌شود که فرکانس قطع در حالت غیرفعال بودن برهم‌کنش‌های تبدالی و همبستگی از هماهنگ ۲۹-م به هماهنگ ۲۵-م کاهش یافته‌است. این کاهش ناشی از کاهش انرژی یونش مولکول است که برابر  $4 \omega_0 \approx 7.27 \text{ eV} = \Delta I_p$  (جدول ۳) است و با توجه به رابطه (۸) قابل انتظار است.

در جدول ۳ سهم‌های مختلف انرژی مولکول  $N_2O$  در حالت پایه آن به ازای حالت‌های مختلف مورد بررسی در این پژوهش آورده شده‌است.

همان‌طور که در جدول فوق مشاهده می‌شود، انرژی همبستگی حدود ۲/۵ درصد از انرژی کل آن را تشکیل می‌دهد. در نتیجه حذف برهم‌کنش همبستگی به تنهایی نمی‌تواند تأثیر چندانی در طیف هماهنگ‌های مولکول بگذارد. اما مجموع انرژی‌های همبستگی و تبدالی حدود ۲۳ درصد از انرژی کل مولکول را به خود اختصاص داده‌است. لذا تغییر یا حذف هم‌زمان این دو برهم‌کنش (به‌ویژه برهم‌کنش تبدالی) اثرات قابل ملاحظه‌ای در شدت و گستره‌ی هماهنگ‌های تولید شده از مولکول  $N_2O$  به جای می‌گذارد. سهم انرژی‌های همبستگی و تبدالی در انرژی کل مولکول، نتایج مشاهده شده در شکل ۴ را به خوبی توجیه می‌کنند.

#### ۴. نتیجه‌گیری

نتایج این پژوهش نشان داد که حضور بیش از یک الکترون در فرایند HHG منجر به افزایش شدت هماهنگ‌ها به اندازه یک مرتبه بزرگی، به ویژه در ناحیه فرکانس قطع خواهد شد. این نتیجه در مورد سیستم‌هایی که آخرین تراز پر شده آن‌ها تهیگن است (مانند آرگون و مونوکسید دی نیترژن) بهتر مشاهده خواهد شد. هم‌چنین مشاهده شد که برهم‌کنش همبستگی بین الکترون‌ها می‌تواند فرکانس قطع را به اندازه یک شماره هماهنگ افزایش دهد، در حالی که شدت هماهنگ‌های تولید



شکل ۵. الف) مقایسه طیف هماهنگ‌های تولید شده در مدل هشت-الکترونی و تک-الکترونی. ب) مقایسه طیف هماهنگ‌های تولید شده با حضور همه برهم‌کنش‌ها و بدون حضور برهم‌کنش همبستگی. پ) مقایسه طیف هماهنگ‌های تولید شده با حضور همه برهم‌کنش‌ها و بدون حضور برهم‌کنش‌های تبدالی و همبستگی.

جدول ۳. سهم‌های مختلف انرژی مولکول  $N_2O$  در حالت پایه آن به ازای فعال و غیرفعال بودن برهم‌کنش‌های تبدالی و همبستگی. همه مقادیر با واحد eV هستند.

|               | بدون $V_{xc}$ | بدون $V_c$ | با حضور همه برهم‌کنش‌ها |
|---------------|---------------|------------|-------------------------|
| $E_{kinetic}$ | ۵۷۱,۰۹        | ۶۷۱,۰۷     | ۶۷۱,۸۲                  |
| $V_{int}$     | ۸۷۰,۶۹        | ۸۷۰,۶۹     | ۸۷۰,۶۹                  |
| $V_{ne}$      | -۳۷۱۲,۳۲      | -۳۹۴۳,۰۱   | -۳۹۴۴,۶۳                |
| $V_H$         | ۱۵۱۰,۲۴       | ۱۶۵۰,۶۶    | ۱۶۵۱,۶۹                 |
| $V_x$         | .             | -۱۹۸,۳۷    | -۱۹۸,۵۲                 |
| $V_c$         | .             | .          | -۲۵,۲۵                  |
| $E_{total}$   | -۷۶۰,۲۹       | -۹۴۸,۹۵    | -۹۷۴,۱۹                 |

9. P. Tenio, et al, *Bright coherent ultrahigh harmonics in the keV x-ray regime from mid-infrared femtosecond lasers*, *Science*, **336**(6086), 1287-1291 (2012).
10. K. Zhao, et al, *Tailoring a 67 attosecond pulse through advantageous phase-mismatch*, *Optics Letters*, **37**(18), 3891-3893 (2012).
11. G. Vampa, et al, *Plasmon-enhanced high-harmonic generation from silicon*, *Nature Physics*, **13**(7), 659 (2017).
12. M. Toru, et al, *Accurate retrieval of structural information from laser-induced photoelectron and high-order harmonic spectra by few-cycle laser pulses*, *Physical Review Letters*, **100**(1), 013903 (2008).
13. J. Itatani, et al, *Tomographic imaging of molecular orbitals*, *Nature*, **432** (7019), 867 (2004).
14. P.B. Corkum, *Plasma perspective on strong field multiphoton ionization*, *Physical Review Letters*, **71**(13), 1994 (1993).
15. M. Lewenstein, et al, *Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields*, *Physical Review A*, **49**(3), 2117 (1994).
16. M. Monfared, E. Irani, R. Sadighi-Bonabi, *Controlling the multi-electron dynamics in the high harmonic spectrum from N<sub>2</sub>O molecule using TDDFT*, *The Journal of Chemical Physics*, **148**(23), 234303 (2018).
17. Parr, Robert G. *Density functional theory of atoms and molecules*, *Horizons of Quantum Chemistry*, Springer, Dordrecht, 5-15 (1980).
18. Hartwigsen, C., Sephen Gædecker, Jürg Hutter, *Relativistic separable dual-space Gaussian pseudopotentials from H to Rn*, *Physical Review B*, **58**.7, 3641 (1998).
19. Perdew, John P., Alex Zunger, *Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems*, *Physical Review B*, **23**.10, 5048 (1981).
20. Andrade, Xavier, et al., *Real-space grids and the Octopus code as tools for the development of new simulation approaches for electronic systems*, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **17**(47), 31371-31396 (2015).
21. Lewenstein, Maciej, et al., *Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields*, *Physical Review A*, **49**.3, 2117 (1994).
22. Antoine, Philippe, Bernard Piraux, Alfred Maquet, *Time profile of harmonics generated by a single atom in a strong electromagnetic field*, *Physical Review A*, **51**.3, R1750 (1995).
23. Feng, Liqiang, Hang Liu, *Attosecond-resolution molecular high-order harmonic emission and isolated attosecond pulse generation from H<sub>2</sub><sup>+</sup>*, *Optics Communications*, **389**, 144-149 (2017).
24. Wörner, Hans Jakob, et al, *Observation of electronic structure minima in high-harmonic generation*, *Physical Review Letters*, **102**.10, 103901 (2009).
25. Rupenyan, Alisa, et al, *High-harmonic spectroscopy of isoelectronic molecules: Wavelength scaling of electronic structure and multielectron effects*, *Physical Review A*, **87**.3, 033409 (2013).
26. Bian, Xue-Bin, André D. Bandrauk, *Multichannel molecular high-order harmonic generation from asymmetric diatomic molecules*, *Physical Review Letters*, **105**.9, 093903 (2010).

شده تقریباً ثابت می‌ماند. تأثیر ناچیز برهم‌کنش همبستگی روی فرایند HHG به دلیل انرژی اندک آن در مقایسه با انرژی کل سیستم (حدود ۲ درصد برای آرگون و ۲/۵ درصد برای مولکول مونوکسید دی نیتروژن) است. اثر هم‌زمان برهم‌کنش‌های تبدالی و همبستگی در فرایند تولید هماهنگ‌ها قابل توجه است. مجموع انرژی تبدالی و همبستگی آرگون در حدود ۱۷ درصد انرژی کل آن و در مولکول مونوکسید دی نیتروژن حدود ۲۳ درصد است. در نتیجه وجود این دو برهم‌کنش، انرژی یونش سیستم را به‌طور قابل توجهی افزایش می‌دهد و در نتیجه باعث افزایش فرکانس قطع می‌شود. افزایش فرکانس قطع در اتم آرگون حدود ۵ مرتبه هماهنگ و در مولکول مونوکسید دی نیتروژن حدود ۴ مرتبه هماهنگ مشاهده شد. البته شایان ذکر است که حضور برهم‌کنش‌های تبدالی و همبستگی در هر دو سیستم مطالعه شده در این پژوهش، شدت هماهنگ‌ها را تا یک مرتبه بزرگی کاهش می‌دهد.

### تشکر و قدردانی

نویسندگان از همکاری مشترک دانشگاه خوارزمی، وزارت علوم، تحقیقات و فن‌آوری جمهوری اسلامی ایران و وزارت علوم اتریش تحت برنامه همکاری مشترک ایران- اتریش (IAJP) برای حمایت مالی پروژه با شماره ۴/۱۱۷۶۳ تشکر می‌کنند.

### مراجع

1. K. Nicolai, et al, *Polarization-state-resolved high-harmonic spectroscopy of solids*, *Nature communications*, **10** (1), 1319 (2019).
2. P. Peng, C. Marceau, D.M. Villeneuve, *Attosecond imaging of molecules using high harmonic spectroscopy*, *Nature Reviews Physics*, **1**(2), 144 (2019).
3. F. Lei, et al, *Correlations in high-harmonic generation of matter-wave jets revealed by pattern recognition*, *Science*, **363**, 6426, 521-524 (2019).
4. J. Shicheng, et al, *Role of the transition dipole amplitude and phase on the generation of odd and even high-order harmonics in crystals*, *Physical Review Letters*, **120**(5), 253201 (2018).
5. L. Hanzhe, et al, *Enhanced high-harmonic generation from an all-dielectric metasurface*, *Nature Physics*, **14**(10), 1006 (2018).
6. T.J. Hammond, et al, *Integrating solids and gases for attosecond pulse generation*, *Nature Photonics*, **11**(9), 594 (2017).
7. C. Henning, et al, *High-harmonic generation at 250 MHz with photon energies exceeding 100 eV*, *Optica*, **3**(4), 366-369 (2016).
8. M. Monfared, E. Irani, R. Sadighi-Bonab, *Enhancing high harmonic generation by the global optimization of two-color chirped laser field*, *Physical Chemistry Chemical Physics*, (2019).

### COPYRIGHTS

©2021 The author(s). This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution (CC BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, as long as the original authors and source are cited. No permission is required from the authors or the publishers.



استناد به این مقاله

محمد منفرد، الناز ایرانی، رسول صدیقی، محمدکاظم مروج‌فرشی (۱۳۹۹)، بررسی اثر برهم‌کنش‌های تبدالی و همبستگی در طیف هماهنگ‌های مراتب بالا، ۹۴-۱-۱۰

DOI: 10.24200/nst.2021.1157

Url: [https://jonsat.nstri.ir/article\\_1157.html](https://jonsat.nstri.ir/article_1157.html)

www.SID.ir