



معرفی روش بهینه‌سازی برای افزایش ناحیه تخت در تولید هماهنگ‌های مراتب بالا از مولکول فلوئور

زهرا خداپنده*^۱، رسول صدیقی بناپی^۲، محمدحسین مجلس آرا^۱

۱. دانشکده فیزیک، دانشگاه خوارزمی، صندوق پستی: ۱۴۹۱۱-۱۵۷۱۹، تهران-ایران

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

*Email: zzkhodabandeh@gmail.com

مقاله‌ی پژوهشی

تاریخ دریافت مقاله: ۹۹/۲/۲۷ تاریخ پذیرش مقاله: ۹۹/۷/۸

چکیده

یک مدل بهینه‌سازی نیمه‌کلاسیک جهت کنترل فرایند تولید هماهنگ‌های مراتب بالا و افزایش فرکانس قطع معرفی شده است. ویژگی و مشخصات میدان لیزر تابشی جهت بهینه‌سازی فرکانس قطع توسط این مدل تعیین شده است. صحت این مدل بهینه‌سازی نیمه‌کلاسیک توسط طیف هماهنگ‌های مراتب بالا از مولکول فلوئور براساس روش کوانتومی در حالت اعمال میدان لیزر دو-رنگی مورد ارزیابی قرار گرفته و تأیید شده است. طیف هماهنگ مراتب بالا با کمک نظریه تابعی چگالی وابسته زمانی در سه بعد حقیقی با استفاده از برنامه اختاپوس انجام گرفته است. نتایج مطالعه نشان داد با ترکیب دو میدان لیزر در حالت بهینه شده، فرکانس قطع مولکول فلوئور ۹۶٪ نسبت به اعمال ترکیب بهینه نشده دو میدان لیزر افزایش می‌یابد. همچنین پهنای زمانی پالس آتوتانیبه تولید شده از ۲۰۰ as در حالت اعمال میدان دو-رنگی بهینه شده به ۱۳۵ as در حالت اعمال میدان دو-رنگی بهینه شده کاهش یافته است.

کلیدواژه‌ها: تولید هماهنگ مراتب بالا، پالس آتوتانیبه

Introducing an optimization model for extending the high harmonic spectrum plateau from fluorine molecule

Z. Khodabandeh*¹, R. Sadighi-Bonabi², M.H. Majlesara¹

1. Department of Physics, Kharazmi University, P.O. Box: 14911-15719, Tehran - Iran

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

Research Article

Received 16.5.2020, Accepted 29.9.2020

Abstract

A semi-classical optimization model is introduced for controlling the high-order harmonic generation process and extending the cutoff frequency. This method is capable of defining the driving laser shape interact with the F₂ molecule for maximizing the cutoff frequency properly. This optimization procedure is evaluated by examining the high harmonic spectrum from the F₂ molecule irradiated by a two-color laser field. High harmonic spectrum is done using time-dependent density functional theory in a three-dimensional space. The results showed that adding two driving laser pulses with optimization could enhance the cutoff frequency by 96% compared to two driving laser pulses without optimization. In addition, this model for the F₂ molecule is capable of reducing the output attosecond pulse duration from 200 as not optimized two-color laser to 135 as the optimized two-color laser.

Keywords: High harmonic generation, Attosecond pulse



۱. مقدمه

دو پالس لیزر به صورت تجربی نیز انجام گرفته است و مطابقت بین نتایج نظری و تجربی نیز در بررسی‌ها دیده می‌شود [۱۵]. روش متفاوت برای بهینه‌سازی پارامترهای لیزر در جهت کنترل فرایند HHG ارایه می‌شود [۱۶] تا فرکانس قطع مولکول F_2 را افزایش دهد. این روش براساس مدل نیمه‌کلاسیک سه گام بنا شده است و شرایط بهینه برای دستیابی به پالس‌های با فرکانس قطع بیشتر و پهنای زمانی کوتاه‌تر نسبت به حالت بهینه نشده، ارایه می‌دهد که به صورت کامل در بخش محاسباتی بیان می‌شود. در مرجع [۱۶] بهینه‌سازی با استفاده از دو مشخصه لیزر از جمله پارامتر چرپ و فاز پوش-حامل برای میدان لیزر دو-رنگی که بر مولکول N_2O اثر کرده است، ارایه شده و مقایسه بین طیف‌های هماهنگ مراتب بالا ناشی از میدان‌های تک-رنگی و دو-رنگی بهینه شده، نشان از افزایش فرکانس قطع طیف هماهنگ‌های مراتب بالا ناشی از دو-رنگی بهینه شده به اندازه ۱۰۳٪ نسبت به فرکانس قطع هماهنگ مراتب بالا ناشی از میدان تک-رنگی است. در نتایج این تحقیق، به مقایسه بین طیف‌های هماهنگ‌های مراتب بالا ناشی از میدان‌های دو-رنگی بهینه شده و بهینه نشده پرداخته نشده است. در حالی که در مقاله حاضر علاوه بر دو مشخصه بیان شده از مشخصه دیگر لیزر یعنی تأخیر زمانی بین دو پالس لیزر نیز استفاده می‌شود و به مقایسه بین طیف‌های هماهنگ مراتب بالا ناشی از میدان‌های دو-رنگی بهینه شده و بهینه نشده پرداخته می‌شود. طیف‌های هماهنگ مراتب بالا حاصل از تابش پالس‌های لیزر فمتوثانیه بر مولکول F_2 با کمک نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان (TDDFT) توسط کد اختاپوس [۱۷] انجام شده است تا صحت روش بهینه‌سازی و پیش‌بینی آن را تأیید کند.

۲. بخش محاسبات

۱۰۲ روش بهینه‌سازی نیمه‌کلاسیک

فرکانس قطع از روابط نیمه‌کلاسیک قابل دستیابی است، که به صورت زیر بیان می‌شود [۱۶]:

$$\omega_{cut-off} = I_p + K_{max} \quad (1)$$

مشاهده مستقیم و کنترل دینامیک الکترونیکی در اتم‌ها و مولکول‌ها نیاز به پالس‌های لیزر آتوثانیه در ناحیه فرابنفش دارد [۱]. در دهه‌ی ۶۰ میلادی پهنای زمانی پالس‌های لیزر، در محدوده‌ی زمانی صدها نانوثانیه بود که پس از ابداع روش قفل‌شدگی مدها در سال ۱۹۶۶، پهنای زمانی آن‌ها به پیکوثانیه کاهش یافت. با پیشرفت در فن‌آوری لیزرها و تقویت آن‌ها با روش تقویت پالس چرپ شده^۱ (CPA) پالس‌های فمتوثانیه تولید شدند [۲].

تولید هماهنگ‌های مراتب بالا^۲ (HHG) یکی از روش‌های مهم تولید پالس‌های آتوثانیه^۳ (۱۰-۱۸ ثانیه) است [۳-۵]. طی فرایند HHG پالس‌های لیزر پرشدت در ناحیه نزدیک فروسرخ و مریی با پهنای زمانی فمتوثانیه به پالس‌های لیزر اشعه X و XUV با پهنای زمانی آتوثانیه تبدیل می‌شود [۶]. این پدیده اولین بار در سال ۱۹۸۷ توسط مک فرسون^۴ و همکارانش مشاهده شد [۲]. در سال ۱۹۹۳ چگونگی تولید پالس آتوثانیه و اندازه‌گیری پالس‌های بسیار کوتاه از مرتبه آتوثانیه بر پایه اپتیک غیرخطی توضیح داده شد [۷].

برای توصیف HHG نظریه مدل «سه گام»^۵ ارایه شد [۶، ۷]. براساس این مدل، ابتدا الکترون به روش تونل‌زنی تحت تأثیر 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 اشعه X گسیل می‌کند. بیش‌ترین مقدار انرژی گسیلی مربوط به فرکانس قطع است که از روابط نیمه‌کلاسیک قابل دستیابی است.

از چالش‌های اساسی در فرایند تولید پالس‌های آتوثانیه در ناحیه اشعه X افزایش فرکانس قطع و کاهش پهنای زمانی پالس آتوثانیه است [۸، ۹]. در راستای حل چالش‌های بیان شده، فرایند HHG توسط ترکیب دو پالس لیزر با فرکانس‌های مرکزی مختلف و تغییر پارامترهای پالس لیزر از جمله پارامتر چرپ [۱۰]، فاز پوش-حامل [۱۱] و تأخیر زمانی بین پالس‌ها [۱۲] کنترل می‌شود [۱۳، ۱۴]. فرایند HHG توسط ترکیب

1. Chirped Pulse Amplification
2. High Harmonic Generation
3. Attosecond
4. McPherson
5. Three Step Model



میدان‌های لیزر دارای طول موج، شدت بیشینه و تعداد چرخه‌های ثابت هستند، ولی مقادیر فاز پوش-حامل (ϕ_j و φ_j)، عامل چرپ (β_j و β_j) و تأخیر زمانی بین پالس‌های لیزر (τ_{ij}) که پنج پارامتر کنترل هستند، دارای مقادیر گسسته زیادی در بازه تعریف شده در جدول ۱ هستند. برحسب این بازه‌ها، میدان‌های لیزر دو-رنگی بسیار زیادی طبق رابطه ۵ قابل دست‌یابی هستند. تمام این میدان‌های لیزر را نوشته و طبق روابط ۵-۱ برحسب این میدان‌های لیزر تولید شده بسیار زیاد، تمام فرکانس‌های قطع به دست می‌آیند. تمام مقادیر فرکانس قطع در جدولی برحسب پارامترهای متغیر (کنترل) نوشته شده و مرتب می‌شوند. سرانجام بالاترین مقدار فرکانس قطع به دست آمده و پارامترهای کنترل که منجر به این مقدار بیشینه فرکانس قطع شده، به عنوان پارامتر بهینه در نظر گرفته می‌شوند. سپس نتیجه در رابطه ۴ (میدان) قرار داده شده و شکل میدان لیزر بهینه به دست می‌آید. میدان لیزری که بیشینه فرکانس قطع را در فرایند HHG به دنبال دارد، پالس لیزری بهینه شده گفته می‌شود. تمام این مراحل در برنامه متلب انجام داده شده است.

۲.۲ محاسبه طیف هماهنگ‌های مراتب بالا توسط نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان
اعتبار مدل بهینه‌سازی توسط محاسبه طیف هماهنگ‌های مراتب بالا که روش کوانتومی است در تابش میدان لیزر بهینه بر مولکول F_2 قابل ارزیابی است. طیف هماهنگ‌های مرتبه بالا از طریق حل معادله کوهن-شم با کمک روش نظریه تابعی چگالی محاسبه می‌شود. معادله کوهن-شم برای سیستمی که از N الکترون تشکیل شده است به صورت زیر است:

$$i \frac{\partial \psi_i(r,t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{KS}(r) \right\} \psi_i(r,t) \quad (6)$$

$$n = \sum_{i=1}^N |\psi_i(r,t)|^2 \quad (7)$$

در رابطه‌های بالا، ψ_i تابع موج یک الکترون یا اوربیتال کوهن-شم (KS)، $n(r,t)$ چگالی الکترونی وابسته به زمان و V_{KS} پتانسیل کوهن-شم می‌باشد که به صورت رابطه (۸) تعریف می‌شود:

$$V_{KS}[n](r,t) = V_{ne}(r) + V_H[n](r,t) + V_{XC}[n](r,t) + V_{ext}[n](r,t) \quad (8)$$

I_P انرژی یونش می‌باشد. K_{max} انرژی جنبشی بیشینه به صورت زیر بیان می‌شود:

$$K_{max} = v^2 / 2 \quad (2)$$

که با محاسبه سرعت الکترون به صورت زیر قابل محاسبه است:

$$v(t) = \int_{t_i}^t -E_L(t) dt, \quad (3)$$

t_i زمان یونش و E_L میدان الکتریکی لیزر است و در حالت کلی برای یک لیزر چند رنگی به صورت تعریف شده است:

$$E_L(t) = \hat{x} \sum_j E_j f_j(t) \cos(\omega_j(t - t_{o,j} - \tau_{ij}) + \Phi_j(t)) \quad (4)$$

$$f_j(t) = \sin^2\left(\frac{\pi t}{nT}\right), \quad T_j = \frac{2\pi}{\omega_j},$$

$$\Phi_j(t) = \frac{\beta_j \omega_j}{nT_j} (t - t_{o,j})^2 + \phi_j, \quad E_j = \sqrt{\frac{cI_j}{\lambda\pi}} \quad (5)$$

$f_j(t)$ تابع پوش، ω_j فرکانس مرکزی میدان j ام، $t_{o,j}$ زمان در مرکز میدان j ام، ϕ_j فاز پوش حامل^۱ (CEP)، τ_{ij} تأخیر زمانی^۲ بین اولین و j امین میدان لیزر، β_j و I_j به ترتیب پارامتر چرپ و شدت بیشینه مربوط به لیزر j ام هستند. n تعداد چرخه‌های لیزر است که در محاسبات این پژوهش برابر ۳ است. همان‌طور که در روابط بالا نیز مشاهده می‌شود، چرپ به صورت خطی فرض شده است.

مشخصات هر یک از میدان‌های لیزر که در محاسبات استفاده می‌شود در جدول ۱ آمده است. شدت بیشینه لیزرها به نحوی انتخاب می‌شود تا احتمال یونش مولکول فلئور کم‌تر از ۲٪ باقی بماند. این مسأله باعث می‌شود تا اطمینان داشته باشیم که تولید هماهنگ‌های مراتب بالا از مولکول فلئور است نه یون فلئور.

جدول ۱. مشخصات میدان‌های لیزر

J	طول موج مرکزی (nm)	شدت بیشینه (W/cm^2)	تعداد چرخه‌ها	فاز پوش حامل (CEP)	پارامتر چرپ (β)	تأخیر زمانی (τ_{ij})
۱	۸۰۰	2×10^{14}	۳	$(-\pi, \pi)$	$(-3, 3)$	۰
۲	۴۰۰	0.5×10^{14}	۳	$(-\pi, \pi)$	$(-3, 3)$	$(-T_1, T_1)$

1. Carrier Envelope Phase
2. Time Delay



در رابطه بالا q مرتبه هماهنگ و ω_0 فرکانس مرکزی با طول موج 800 نانومتر می‌باشد. دامنه a_q تبدیل فوریه شتاب دوقطبی است:

$$\omega = q \omega_0, a_q = \int \ddot{d}(t') \exp(-i \omega t') dt' \quad (15)$$

در مرحله اول، هدف به دست آوردن ویژگی‌های حالت پایه مولکول است. در این مرحله ویژگی‌های مولکول از جمله فاصله بین اتم‌ها، تعداد اتم‌ها و اندازه آن‌ها در برنامه اختاپوس وارد شده و به روش نظریه چگالی تابعی^۱ بررسی می‌شوند. سپس حالت پایه مولکول به دست آمده و از طریق اثر انتشارگر زمان بر این حالت پایه، تابع موج وابسته زمان به دست می‌آید. در مرحله دوم با اعمال میدان پالسی لیزر که میدان الکتریکی وابسته به زمان است، دینامیک و رفتار زمانی مولکول به روش نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان بررسی می‌شود. نتیجه حاصل از اختاپوس که شتاب دوقطبی سیستم است با کمک روابط ۱۰، ۱۲ و ۱۴ از طریق برنامه‌نویسی در متلب به صورت طیف هماهنگ‌های مراتب بالا، نمودار زمان-فرکانس و شکل پالس آتوتانیه نشان داده می‌شود.

۳. نتایج

۱.۳ مقایسه تولید هماهنگ‌ها ناشی از میدان دو-رنگی بهینه نشده و میدان دو-رنگی بهینه شده
در این بخش میدان لیزر دو-رنگی بهینه نشده^۲ (TC) و دو-رنگی بهینه شده^۳ (OTC) بر مولکول فلئوئور تابیده می‌شود. مشخصات میدان‌های تابشی بر مولکول در جدول ۲ آمده است. در این جدول، پارامترهای بهینه $(\varphi_1, \varphi_2, \beta_1, \beta_2, \tau_1, \tau_2)$ میدان دو-رنگی که طبق روش نیمه کلاسیک به دست آمده (در بخش محاسبات نیمه کلاسیک به‌طور کامل شرح داده شد)، نشان داده شده است. میدان لیزر دو-رنگی حاصل از این مقادیر بهینه بر مولکول فلئوئور تابیده شده و مقدار فرکانس قطع طبق رابطه ۵ از طریق جمع انرژی‌های جنبشی و یونش به دست می‌آید. نمودار جمع انرژی‌های جنبشی و یونش بر حسب زمان چرخه میدان لیزر در شکل‌های ۱ الف و ۱ ب رسم شده است. بیشینه این نمودارها طبق رابطه ۱ مقدار فرکانس قطع پیش‌بینی نیمه کلاسیک است که این مقادیر پیش‌بینی شده در جدول ۲ بیان شده است.

در رابطه بالا V_{ne} پتانسیل کولمبی بین الکترون و مجموعه هسته‌ها، $V_H[n]$ پتانسیل کولمبی کلاسیکی بین الکترون‌ها (پتانسیل هارتتری)، V_{XC} پتانسیل تبادل-همبستگی است. V_{ext} پتانسیل خارجی شامل برهم‌کنش میدان لیزر با مولکول فلئوئور است که از تقریب دوقطبی الکتریکی قابل محاسبه است و به صورت رابطه ۹ بیان می‌شود:

$$V_{ext}(r, t) = -E(t) \cdot r \quad (9)$$

میدان لیزر دارای قطبش خطی در جهت z و هم‌راستا با محور مولکول در نظر گرفته شده است. تبدیل فوریه مشتق مرتبه دوم گشتاور دوقطبی (شتاب دوقطبی) منجر به طیف هماهنگ مرتبه بالا می‌شود:

$$S(\omega) = \left| \int_0^{T_{tot}} \ddot{d} \exp(-i \omega t) dt \right|^2 \quad (10)$$

در رابطه ۱۰، T_{tot} پهنای زمانی پالس لیزر اعمالی می‌باشد. شتاب دوقطبی سیستم \ddot{d} از نظریه ارنفست به دست می‌آید:

$$\ddot{d} = \sum_{i=1}^N \langle \psi_i(r, t) | \nabla V_{KS} | \psi_i(r, t) \rangle \circ \quad (11)$$

بر اساس تبدیل گابور آنالیز زمان-فرکانس برای شتاب دوقطبی اعمال می‌شود:

$$A(t, \omega) = \int_0^t W(\omega, t, t') \ddot{d}(t') dt' \quad (12)$$

تابع پنجره $W(\omega, t, t')$ با فرکانس ω در زمان t نوسان می‌کند و طبق رابطه ۱۳ تعریف می‌شود:

$$W(\omega, t, t') = \exp(i\omega t') \exp\left(-\frac{(t-t')^2}{2\sigma^2}\right) \quad (13)$$

پالس آتوتانیه از طریق جمع شدت‌ها در بازه هماهنگ‌های مشخص به دست می‌آید:

$$I(t) = \left| \sum_q a_q \exp(-iq \omega t) \right|^2 \quad (14)$$

1. Density Functional Theory
2. Not Optimized Two-Color
3. Optimized Two-Color



جدول ۲. مشخصات میدان‌های دو-رنگی بهینه شده و نشده به همراه فرکانس‌های قطع نیمه‌کلاسیک

فرکانس قطع	τ_{12} (fs)	β_2	φ_2	$I_2 \left(\frac{W}{cm^2} \right)$	(nm) λ_2	β_1	φ_1	$I_1 \left(\frac{W}{cm^2} \right)$	λ_1 (nm)	حالت بهینه‌سازی	
$48\omega_0$	۰	۰	۰	0.5×10^{14}	۴۰۰	۰	۰	2×10^{14}	۸۰۰	خیر	دو-رنگی بهینه نشده
$94\omega_0$	۱	-۲	$\frac{\pi}{3}$	0.5×10^{14}	۴۰۰	-۲	$\frac{\pi}{3}$	2×10^{14}	۸۰۰	بله	دو-رنگی بهینه شده

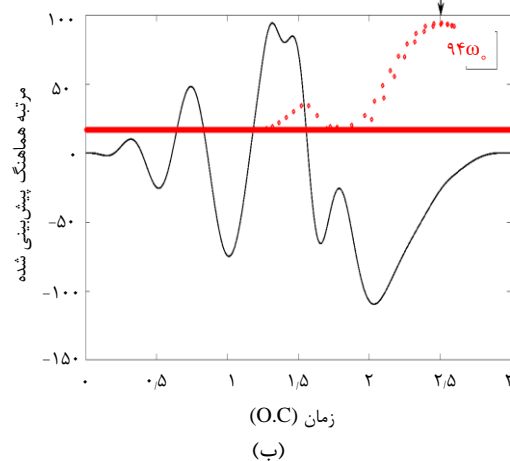
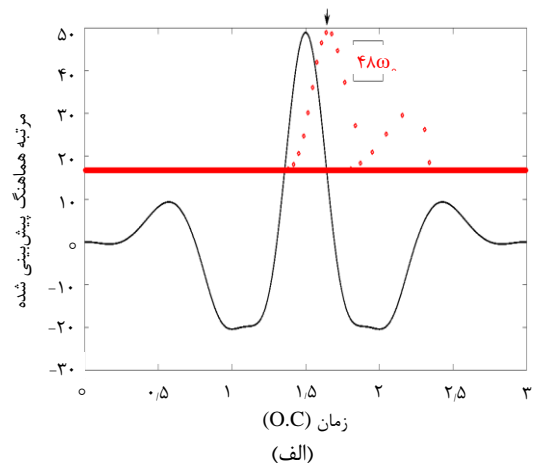
بهینه‌سازی میدان ۹۶٪ نسبت به مقدار فرکانس قطع این مولکول حاصل از میدان دو-رنگی بهینه نشده افزایش یافته است.

در شکل ۱ میدان‌های لیزر با رنگ مشکی و نمودارهای جمع انرژی‌های جنبشی و یونش برحسب زمان چرخه میدان لیزر به صورت دایره‌های قرمز نشان داده شده است که بیشینه مقادیر (فرکانس‌های قطع) این نمودارها به ترتیب $48\omega_0$ ناشی از میدان دو-رنگی بهینه نشده و $94\omega_0$ ناشی از میدان دو-رنگی بهینه شده در زمان‌های (O.C.) $t=1.75$ و $t=2.25$ از چرخه اپتیکی هستند.

مقدار انرژی گسیلی در پدیده HHG در هر زمانی از چرخه اپتیکی از طریق ضرب مرتبه هماهنگ پیش‌بینی شده مربوط به آن زمان در ω_0 به دست می‌آید.

شکل طیف هماهنگ مراتب بالا و نمودار زمان-فرکانس از روابط کوانتومی و با کمک نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان به دست می‌آید. میدان الکتریکی TC به رنگ مشکی و میدان OTC به رنگ آبی در شکل ۲ الف مشاهده می‌شود. در شکل ۲ ب طیف‌های هماهنگ‌های مراتب بالا ناشی از TC و OTC را نشان می‌دهد. محور افقی زمان برحسب چرخه اپتیکی و محور عمودی مرتبه هماهنگ مرتبه بالا می‌باشد، بعد از بهینه‌سازی، مقادیر فرکانس قطع از $48\omega_0$ به $94\omega_0$ افزایش یافته است. این نتیجه کوانتومی در تطابق با افزایش فرکانس قطع پیش‌بینی شده نیمه‌کلاسیک در جدول ۲ است و تأییدی بر صحت روش بهینه‌سازی است.

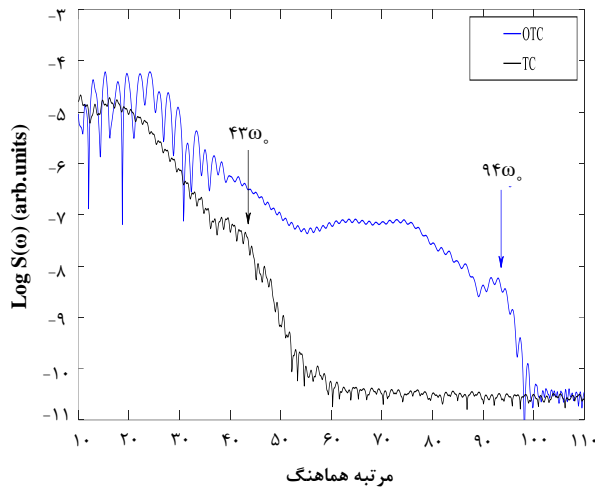
با مقایسه شکل ۲ ب با شکل‌های ۱ الف و ۱ ب می‌توان گفت که فرکانس قطع در طیف هماهنگ‌ها ناشی از میدان‌های TC و OTC با مقدار پیش‌بینی شده حاصل از رابطه $K_{max} + I_p^{(7)}$ یعنی الکترون از تراز HOMO-۲ در یونش شرکت کرده است.



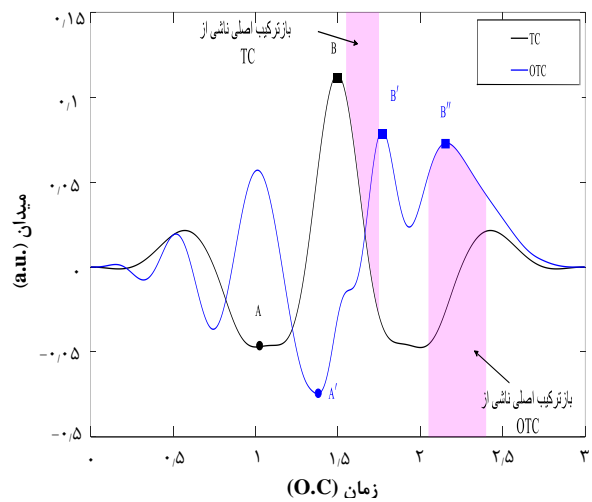
شکل ۱. الف) نمودار جمع انرژی‌های جنبشی و یونش $(K + I_p^{(7)})$ در حالت تابش میدان لیزر دو-رنگی بهینه نشده با دایره‌های قرمز. ب) نمودار جمع انرژی‌های جنبشی و یونش $(K + I_p^{(7)})$ در حالت تابش میدان لیزر دو-رنگی بهینه شده با دایره‌های قرمز. نمودار میدان مربوطه در هر شکل ضرب در ۵۰۰ با خط مشکی (از لحاظ مقیاسی) نشان داده شده است. محور افقی زمان برحسب چرخه اپتیکی و محور عمودی مرتبه هماهنگ مرتبه بالای پیش‌بینی شده است.

نمودار جمع انرژی‌های جنبشی و یونش، زمان رویداد فرکانس قطع را نشان می‌دهد. مدل نیمه‌کلاسیک پیش‌بینی می‌کند، بعد از بهینه‌سازی، مقادیر فرکانس قطع از $48\omega_0$ به $94\omega_0$ افزایش یابد. مقادیر فرکانس قطع مولکول فلوتور بعد از

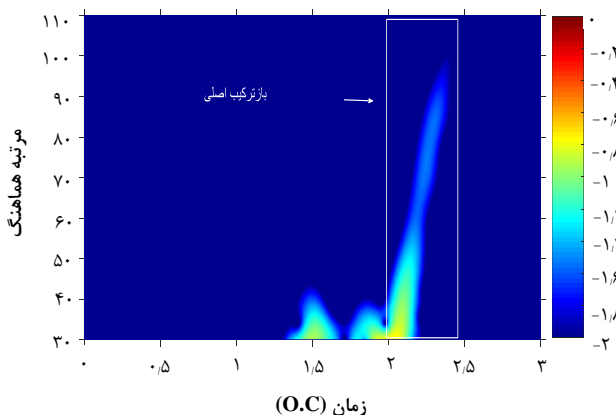




(ب)

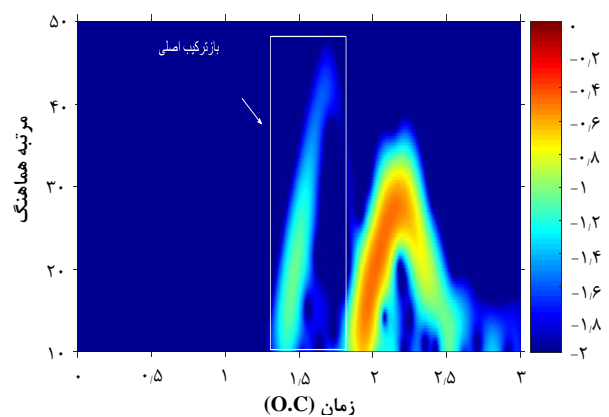


(الف)



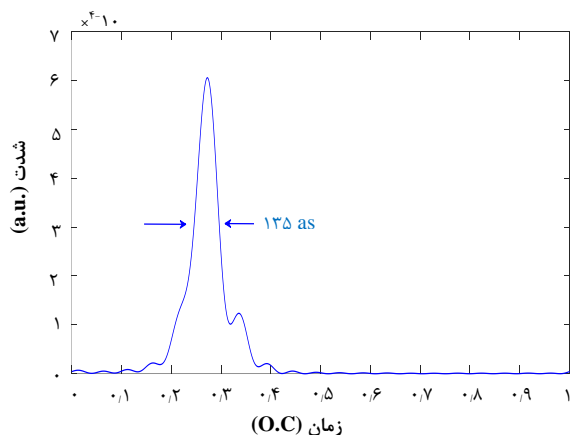
(O.C) زمان

(د)

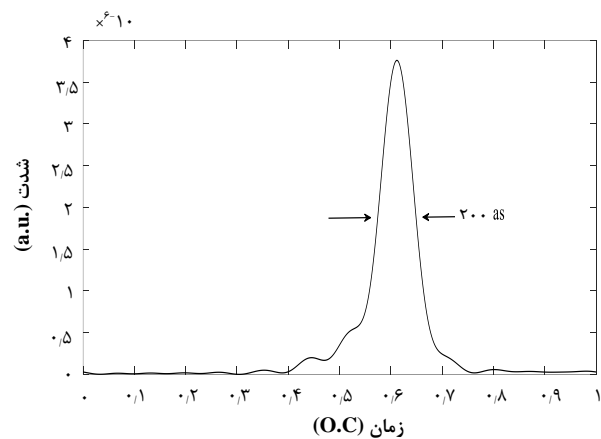


(O.C) زمان

(ج)



(ت)



(پ)

شکل ۲. (الف) شکل میدان‌های TC و OTC. (ب) طیف هماهنگ مرتبه بالا (HHG) حاصل از برهم‌کنش میدان‌های TC و OTC با مولکول F_2 با کمک روش TDDFT. نمودار زمان-فرکانس ناشی از میدان TC، (ج) و ناشی از میدان OTC، (د) از طریق TDDFT. پالس آتوتانیبه حاصل از برهم‌کنش میدان TC، (پ) و میدان OTC، (ت) با مولکول F_2 .

و OTC است. بنابراین الکترونی که مسئول فرکانس قطع است در نقطه $A(A')$ بعد از یونش رها شده است و حول نقطه $B(B'', B')$ شتاب گرفته است (شکل ۲ الف). دامنه میدان TC در نقطه B بالاتر از دامنه میدان OTC در نقطه B' و B''

نمودارهای زمان-فرکانس در شکل‌های ۲ ج و ۲ د نشان داده شده است. این نمودارها نیز افزایش فرکانس قطع بعد از بهینه‌سازی را تأیید می‌کنند. باز ترکیب‌های اصلی حول $t=1,75$ (o.c.) و $t=2,25$ (o.c.) به ترتیب برای میدان‌های TC



بهینه‌سازی این پارامترها و یافتن مقادیر مناسب آن‌ها، شکل بهینه میدان‌های لیزر دو-رنگی به دست می‌آید. با استفاده از این روش بهینه‌سازی، فرکانس قطع مولکول فلئوئور توسط میدان دو-رنگی بهینه، ۹۶٪ نسبت به حالت نسبت به حالت غیر بهینه دو-رنگی افزایش یافته است و پهنای زمانی پالس آتوتانیه از ۲۰۰ آتوتانیه توسط میدان لیزر دو-رنگی غیر بهینه به ۱۳۵ آتوتانیه توسط میدان لیزر دو-رنگی بهینه در خروجی کاهش یافته است، همچنین بهره پالس آتوتانیه در حالت بهینه شده نسبت به این بهره در حالت بهینه نشده، افزایش یافته است. با به‌کارگیری این روش بهینه‌سازی، اهداف مورد توجه یعنی افزایش فرکانس قطع مولکول و کاهش پهنای زمانی پالس آتوتانیه خروجی محقق شده است.

است؛ ولی الکترون رها شده بعد از یونش در حین شتاب گرفتن تحت قله‌های پشت سرهم B' و B'' در میدان OTC انرژی جنبشی بیشتری نسبت به الکترونی که در حین شتاب گرفتن تحت یک قله B در میدان TC است، را به دست می‌آورد. بنابراین فرکانس قطع حاصل از OTC بیش‌تر از فرکانس قطع حاصل از TC است. به منظور دست‌یابی به پالس آتوتانیه باید شدت‌های به دست آمده در بازه فرکانسی نمایش داده شده را در طیف هماهنگ مراتب بالا (شکل ۲ ب) جمع کرد (طبق رابطه ۱۴) اگر شدت‌ها در این بازه، هم‌دامنه باشند، پالس آتوتانیه کوتاه‌تر از لحاظ زمانی و با شدت بیشتری به دست می‌آید. بازه مراتب هماهنگ از ۳۳ام - ۴۸ام ناشی از میدان TC و بازه ۵۰ام - ۹۴ام ناشی از میدان OTC به منظور تولید پالس‌های آتوتانیه جمع می‌شوند. پهنای زمانی پالس آتوتانیه بعد از بهینه‌سازی از ۲۰۰ as به ۱۳۵ as کاهش یافته است. طبق شکل ۲ ب بعد از بهینه‌سازی طیف هماهنگ مراتب بالا دارای پهنای تخت‌تر و هم‌دامنه‌تر نسبت به طیف هماهنگ مراتب بالا قبل از بهینه‌سازی است، بنابراین بازه فرکانسی بعد از بهینه‌سازی بزرگ‌تر و هم‌دامنه‌تر نسبت به بازه فرکانسی قبل از بهینه‌سازی است. با افزایش پهنای فرکانسی، پهنای زمانی پالس آتوتانیه طبق تبدیل فوریه کاهش می‌یابد. همچنین شدت طیف هماهنگ‌های مراتب بالا بعد از بهینه‌سازی در بازه فرکانسی ۵۰ام - ۹۴ام بیش‌تر از شدت طیف هماهنگ‌های مراتب بالا در بازه ۳۳ام - ۴۸ام قبل از بهینه‌سازی می‌باشد. بنابراین بعد از جمع‌بندی روی شدت‌ها، شدت بیشینه در نمودار پالس آتوتانیه در حالت بهینه‌شده (6×10^{-4}) نسبت به این بیشینه در حالت بهینه نشده (1.2×10^{-5}) افزایش یافته است.

۴. نتیجه‌گیری

در این پژوهش تولید هماهنگ‌های مراتب بالا در مولکول فلئوئور مورد بررسی قرار گرفت و به منظور افزایش فرکانس قطع هماهنگ‌های تولید شده و کاهش پهنای زمانی پالس آتوتانیه، چند عامل مؤثر در تولید هماهنگ‌های مراتب بالا شناسایی شدند. از ترکیب دو پالس لیزر به منظور تابش بر مولکول فلئوئور استفاده می‌شود. از جمله مهم‌ترین این عوامل عبارتند از: عامل چرپ، فاز پوش-حامل و تأخیر زمانی بین پالس‌های دو لیزر. در این روش که بر مبنای مدل نیمه‌کلاسیکی سه-گام است، همه پارامترهای مؤثر بیان شده در فرکانس قطع به‌طور هم‌زمان بهینه‌سازی می‌شوند. با



1. R. Kienberger, et al, *Atomic transient recorder*, Nature. 427, 817 (2004).
2. A. McPherson, et al, *Studies of multiphoton production of vacuumultraviolet radiation in the rare gases*, Journal of the Optical Society of America B, **4**, 595 (1987).
3. C. Spielmann, et al, *Generation of coherent X-rays in the water window using 5-femtosecond laser pulses*, Science (80-.). **278**, 661-664 (1997).
4. M.-C. Chen, *Bright, coherent, ultrafast soft x-ray harmonics spanning the water window from a tabletop light source*, Phys. Rev. Lett. **105**, 173901 (2010).
5. K. Zhao, et al, *Tailoring a 67 attosecond pulse through advantageous phase-mismatch*, Opt. Lett. **37**, 3891-3893 (2012).
6. M. Lewenstein, et al, *Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields*, Phys. Rev. A. **49**, 2117 (1994).
7. P.B. Corkum, *Plasma perspective on strong field multiphoton ionization*, Phys. Rev. Lett. **71**, 1994 (1993).
8. Y. Chou, et al, *Optimal control of high-order harmonics for the generation of an isolated ultrashort attosecond pulse with two-color midinfrared laser fields*, Phys. Rev. A. **91**, 63408 (2015).
9. D. Peng, *Enhancing high-order harmonic generation by sculpting waveforms with chirp*, Phys. Rev. A. **97**, 53414 (2018).
10. D. Peng, et al, *Enhancing high-order harmonic generation by sculpting waveforms with chirp*, Phys. Rev. A, **97**, 53414 (2018).
11. Y.S. You, et al, *High-harmonic generation in amorphous solids*, Nature Communications, **8**, 724 (2017).
12. Pengfei Wei¹, Candong Liu¹, *Molecular high harmonic generation in a twocolor field*, **18**, (11)/ Optics Epress (2010).
13. I.J. Kim, et al, *Highly efficient high-harmonic generation in an orthogonally polarized two-color laser field*, Phys. Rev. Lett. **94**, 243901 (2005).
14. P. Wei, et al, *Selective enhancement of a single harmonic emission in a driving laser field with subcycle waveform control*, Phys. Rev. Lett. **110**, 233903 (2013).
15. Cornelia Hofmann, Alexandra S. Landsman, Ursula Keller, *Disentangling Long Trajectory Contributions in Two-Colour High Harmonic Generation*, Appl. Sci. **8**, 341 (2018).
16. M. Mofared, E. Irani, R. Sadighi-Bonabi, *Enhancing high harmonic generation by the global optimization of a two-color chirped laser field*, Phys. Chem. Chem. Phys. **21**, 9302–9309 (2019).
17. X. Andrade, *Real-space grids and the Octopus code as tools for the development of new simulation approaches for electronic systems*, Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 31371–31396 (2015).

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

زهرا خداپنده، رسول صدیقی بنایی، محمدحسین مجلس آرا (۱۴۰۰)، معرفی روش بهینه‌سازی برای افزایش ناحیه تخت در تولید هماهنگ‌های مراتب بالا از مولکول فلئور، ۹۶، ۸-۱

DOI: 10.24200/nst.2020.1194

Url: https://jonsat.nstri.ir/article_1194.html

