

## تولید پالس‌های دوگانه آتوتانیه دارای شدت و فاز حامل - پوش یکسان

علی نوید\*، رضا آقبلاغی، و سهیلا مجیدی

دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه بناب، بناب

پست الکترونیکی: ha-navid@ubonab.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۰۷/۳۰؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۳/۰۱/۰۳)

### چکیده:

در این مقاله از دیدگاه نظری به مطالعه تولید تپ آتوتانیه دوگانه با شدت یکسان، فاز حامل - پوش مشابه، پهنای زمانی قابل کنترل و با تأخیر زمانی دلخواه می‌پردازیم. تپ‌های مطلوب، در فرایند تولید هارمونیک‌های بالا در اندرکنش تپ‌های محرک لیزر فمتوتانیه با یون مولکولی نامتقارن  $\text{HeH}^+$  تولید می‌شوند. تولید هارمونیک‌های بالا، با حل عددی مدل یک بعدی معادله شرودینگر وابسته به زمان بررسی می‌شوند. برای یافتن مشخصات بهینه لیزر محرک، از تابع ارزش مناسبی در روش بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک استفاده می‌شود. طیف بسامدی تپ‌های مطلوب با استفاده از یک صافی طیفی مناسب، از بخشی از هارمونیک‌های بالا انتخاب می‌شود. نشان می‌دهیم که تپ‌های آتوتانیه مذکور به فاصله زمانی یک چرخه کامل از میدان الکتریکی لیزر محرک، در طی چرخه‌ای که جهت میدان الکتریکی لیزر مخالف جهت دوقطبی دائمی مولکول است، تولید می‌شوند. در نهایت با محاسبه مشخصات تپ‌های تولید شده و مقایسه آنها با مشخصات مطلوب، کارایی روش ارائه شده کاملاً تأیید می‌شود.

**واژه‌های کلیدی:** تپ‌های آتوتانیه، تولید هارمونیک‌های بالا، مولکول نامتقارن، فاز حامل - پوش

### ۱. مقدمه

پیشرفت‌های حاصل شده در فناوری لیزرها امکان تولید تپ‌های اپتیکی کم چرخه را فراهم کرده است [۱ و ۲]. در سایه این پیشرفت‌ها به کنترل فاز حامل - پوش (CEP) تپ‌ها (فاز میدان الکتریکی موج حامل نسبت به پوش تپ) توجه زیادی شده است [۳ و ۴]. چنین تپ‌هایی در ناحیه طیفی فروسرخ و مرئی در دسترس هستند و در مطالعات کنترل دینامیک الکترونی اتم‌ها در یک میدان لیزری پرشدت استفاده می‌شوند.

علاوه بر این، امروزه توجه زیادی به توسعه تپ‌های دارای فاز حامل - پوش پایدار به ناحیه XUV (فرابنفش فرین) یا حوزه زمانی آتوتانیه وجود دارد [۵ و ۶]. ظهور تپ‌های آتوتانیه

پیشرفت‌های بزرگی را در اندازه‌گیری، تشخیص و کنترل فرایندهای الکترونی فوق سریع داخل اتم‌ها در محدوده زمانی آتوتانیه فراهم کرده است. برخلاف تپ‌های نانوآتوتانیه، پیکوتانیه و فمتوتانیه، برای تپ‌های آتوتانیه امکان استفاده از میدان پرشدت در بازه زمانی بسیار کمتر از فرصت لازم برای یونش الکترون، وجود دارد [۷].

روش‌های مختلفی برای تولید تپ‌های آتوتانیه گزارش شده است: (۱) استفاده از تولید هارمونیک‌های بالا (HHG) در گازها [۸]، پراکندگی القایی رامان [۹ و ۱۰] و استفاده از اندرکنش لیزر با شدت‌های نسبی با پلاسما [۱۱-۱۵].

در فرایندهای تولید هارمونیک‌ها عموماً قطاری از تپ‌های آتوتانیه ایجاد می‌شود [۱۶ و ۱۷]. این درحالی است که اغلب تولید تک تپ و تپ دوگانه با مشخصات قابل کنترل در

<sup>1</sup> Carrier-Envelope Phase

$E_L$  دامنه میدان لیزر،  $\omega_L$  بسامد زاویه‌ای مرکزی لیزر محرک،  $m$  جرم الکترون و  $e$  بار آن است.

برای اتم‌ها، انرژی پتانسیل وابسته به میدان لیزر تحت تغییر علامت در نیم‌چرخه‌های متوالی، وارون-مقارن است. در نتیجه دو تپ آتوتانیه در طی یک چرخه کامل لیزر تولید می‌شوند و شکل موج تپ‌ها وارون-مقارن است. یعنی از یک تپ به تپ مجاور اختلاف فاز  $\pi$  رادیان برای فاز حامل-پوش ایجاد می‌شود. نشان داده شده است که می‌توان با استفاده از مولکول‌های نامقارن قطار تپ‌هایی با فاز یکسان تولید کرد [۳۰-۳۴].

ما در محاسبات خودمان از مدل پتانسیل یک بعدی استفاده می‌کنیم. پتانسیل‌های یک بعدی در حین سادگی، در کشف ویژگی‌های جدید کوانتومی نقش مهمی دارند و نیز نقش اساسی در شبیه‌سازی فرایندهای میدان قوی بر اساس دینامیک کلاسیکی یا نیمه‌کلاسیکی دارند [۳۵-۳۷]. در حالت کلی در صورتی که میدان الکتریکی با قطبش غیرخطی در مورد تولید هارمونیک‌های بالا اعمال شود، گشتاور دوقطبی القایی در مدل یک بعدی ممکن است نسبت مدل سه بعدی انحراف متفاوت باشد. با این حال در مورد تپ لیزر محرک با قطبش خطی، بخش عمده دینامیک سامانه در امتداد میدان الکتریکی تپ لیزر رخ می‌دهد و نشان داده شده است که با انتخاب مناسب پارامترهای پتانسیل یک بعدی می‌توان با حجم کمتری از محاسبات نتایج رضایت بخشی به دست آورد. مدل‌های یک بعدی متفاوتی برای پتانسیل مورد مطالعه قرار گرفته‌اند و نشان داده شده است که استفاده از پتانسیل‌های خاص یک بعدی با پارامترهای مناسب در اندرکنش لیزر فطیبه خطی با اتم، قابلیت مدل‌سازی کلی طیفی هارمونیک‌های بالا را دارند و نتایج بسیار قابل توجه و نزدیک به مدل سه بعدی را به دست می‌دهند [۳۸].

روش ما برای تولید تپ‌های مطلوب بر اساس کنترل مراحل اول و دوم در مدل سه مرحله‌ای نیمه کلاسیکی استوار است: تقارن فرایند یونش در نیم‌چرخه‌های پشت سر هم لیزری با استفاده از یک مولکول نامقارن از بین می‌رود (مرحله اول) و دینامیک الکترونی با استفاده میدان الکتریکی لیزر کنترل می‌شود

کاربردهای مختلف اهمیت زیادی دارد. بنابراین تلاش زیادی در زمینه تولید تک تپ [۱۸-۲۳] و نیز تپ دوگانه آتوتانیه انجام شده است [۹ و ۲۴].

تپ‌های دوگانه آتوتانیه می‌توانند در آزمایش‌های پمپ-کاونده کاربرد داشته باشند. این در حالی است که کاربرد اولیه تک تپ‌های آتوتانیه شامل استفاده از تپ آتوتانیه به همراه میدان فروقرمز قوی (به عنوان مثال: پمپ IR و کاونده XUV) بوده است، تولید تک تپ‌های آتوتانیه قوی، انجام آزمایش‌های پمپ آتوتانیه XUV و کاونده آتوتانیه XUV را امکان پذیر می‌سازد [۲۵]. این موضوع مسئله تولید تپ‌های دوگانه آتوتانیه با تأخیر زمانی قابل کنترل را مطرح می‌کند. به علاوه این تپ‌ها می‌توانند در بررسی همبستگی الکترون‌ها [۲۶] و نیز دینامیک تحریک الکترون‌ها [۷] کاربرد داشته باشند. برای مثال نشان داده شده است که تپ‌های دوگانه تحریک الکترونی و جذب انرژی کمتری نسبت به تک تپ در کریستال  $\text{CaF}_2$  نشان می‌دهند [۷]. در فرایند موسوم به تولید هارمونیک‌های بالا (HHG) در اثر اندرکنش تپ‌های پرشدت با گازهای نادر، سامانه‌های اتمی و مولکولی نور را در بسامدهای معادل با مضارب درست بسامد میدان لیزر گسیل می‌کنند [۲۷ و ۲۸]. این فرایند، منبع تابشی با محدوده طیفی وسیع و با فواصل بسامدی یکسان ایجاد می‌کند. مشابه لیزرهای قفل مدی، تولید هارمونیک‌های بالا شانه‌ای از بسامدها را در ناحیه XUV به وجود می‌آورد و می‌تواند قطاری از تپ‌های آتوتانیه در حوزه زمانی با ترکیب چندین هارمونیک حاصل کند.

فرایند تولید هارمونیک‌های بالا با استفاده از مدل نیمه کلاسیکی سه مرحله‌ای به سادگی توضیح داده می‌شود [۲۹]. در این مدل ابتدا اتم یونیده می‌شود، سپس در میدان لیزر شتاب می‌گیرد و در نهایت با بازگشت به هسته مادر و برخورد به آن، گسیل فوتون پراانرژی صورت می‌گیرد. مطابق با مدل فوق، فرایند کنترل هارمونیک‌های بالا را می‌توان با کنترل هر کدام از مراحل مذکور انجام داد. در این مدل بسامد قطع هارمونیک‌ها از رابطه  $\omega_c = (I_p + 3/17U_p) / \hbar$  قابل محاسبه است که  $I_p$  پتانسیل یونس اتم و  $U_p$  انرژی پوندرماتیو الکترون است. انرژی پوندرماتیو با معادله  $U_p = (eE_L)^2 / 4m\omega_L^2$  داده می‌شود که

$$E_x(\omega) = F\{a(t)\}. \quad (4)$$

شکل زمانی نهایی تپ آتوتانیه را می‌توان با عبور دادن طیف فوق از یک صافی طیفی مناسب در ناحیه XUV و تبدیل وارون فوریه طیف حاصل، ایجاد کرد:

$$E_x(t) = F^{-1}\{E_x(\omega)f(\omega)\}, \quad (5)$$

که در آن  $f(\omega)$  تابع صافی به کار رفته است. ما در این کار از صافی گوسی

$$f(\omega) = \exp\left[-\left(\frac{\omega - \omega_c}{\Delta\omega}\right)^2\right], \quad (6)$$

استفاده خواهیم کرد، که  $\omega_c$  و  $\Delta\omega$  به ترتیب بسامد مرکزی و پهنای طیفی صافی هستند. پوش میدان الکتریکی،  $\varepsilon_x(t)$ ، با استفاده از معادله

$$\varepsilon_x(t) = \pm 2 \left| \int_0^{+\infty} d\omega E_x(\omega) f(\omega) \exp(-i\omega t) \right|, \quad (7)$$

محاسبه می‌شود.

فاز حامل پوش تپ‌های آتوتانیه حاصل شده، از رابطه  $\Phi_{CEP} = \omega_x \delta t$  به دست می‌آید، که  $\delta t$  تأخیر زمانی بین بیشینه پوش و بیشینه میدان الکتریکی و  $\omega_x$  بسامد زاویه‌ای مرکزی شدت طیفی تپ آتوتانیه،  $I(\omega)$ ، است.

حالت پایه مولکول مورد نظر را با استفاده از روش انتشار در زمان موهومی به دست می‌آوریم. این روش بر اساس بیان معادله شرودینگر برحسب زمان موهومی استوار است. با تبدیل  $t \rightarrow -i\tau$  در معادله شرودینگر وابسته به زمان داریم:

$$\hbar \partial \psi(x, \tau) / \partial \tau = -H \psi(x, \tau), \quad (8)$$

که  $\psi(x, \tau)$  تابع موجی است که در زمان  $\tau = 0$  به صورت اتفاقی (و البته بدون گره) انتخاب شده است و در  $\tau = \infty$  به سمت حالت پایه مولکول  $\psi_0(x)$  میل می‌کند [۴۰]. جواب تقریبی معادله فوق را می‌توان به صورت

$$\psi_0(x) \approx e^{-H\tau/\hbar} \psi(x, 0) = \left( e^{-H\Delta t/\hbar} \right)^n \psi(x, 0), \quad (9)$$

نوشت، که  $n = \tau / \Delta t$  تعداد تأثیر عملگر تحول زمانی موهومی را نشان می‌دهد. در این کار ما تابع موج اولیه و حدسی

$$\psi(x, 0) = \exp(-\alpha x^2), \quad (10)$$

را انتخاب کردیم. این تابع مشابه حالت پایه انتخاب می‌شود و با میل دادن  $n$  به بینهایت، تابع موج اختیار شده به ویژه حالت پایه مولکول میل می‌کند. قابل ذکر است که انتخاب‌های متفاوت

(مرحله دوم).

امکان تولید تپ‌های دوگانه آتوتانیه با دامنه‌های قابل کنترل، بدون توجه به فاز حامل - پوش آنها در کارهای قبلی ما بررسی شده است [۳۹]. در اینجا تولید دو تپ آتوتانیه دارای دامنه و فاز حامل - پوش یکسان را دنبال می‌کنیم. تولید تپ‌هایی به تعداد محدود با مشخصات فازی قابل کنترل تاکنون گزارش نشده است. نشان می‌دهیم که با استفاده از اندرکنش لیزر فمتوثانیه با پارامترهای بهینه‌شده، که از طریق الگوریتم ژنتیک به دست آمده‌اند، می‌توان به هدف مطلوب رسید.

## ۲. مبانی نظری و روش محاسباتی

برای انجام محاسبات عددی، از حل عددی معادله شرودینگر وابسته به زمان استفاده می‌کنیم. در این کار از لیزر قطبیده تی‌سافایر با شدتی از مرتبه  $10^{14}$  وات بر سانتیمتر مربع و طول موج مرکزی  $800$  نانومتر به عنوان محرک بهره می‌گیریم. معادله شرودینگر وابسته به زمان برای یک مولکول در حضور میدان الکتریکی در مدل یک بعدی به صورت زیر است:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - xE_L(t) \right] \psi(x, t) = \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t), \quad (1)$$

که در آن

$$V(x) = -\frac{Z_1 e}{\sqrt{1+(x+R/2)^2}} - \frac{Z_2 e}{\sqrt{1+(x-R/2)^2}}, \quad (2)$$

پتانسیل نامتقارن مولکولی و  $E_L$  میدان الکتریکی لیزر است. در معادله فوق،  $R$  فاصله بین دو هسته و  $Z_1 e$  و  $Z_2 e$  بارهای الکتریکی هسته‌ها هستند. ما در محاسبات خود، مقادیر عددی  $Z_1 = 2$ ،  $Z_2 = 1$ ،  $R = 4 a.u.$  را برای مولکول نامتقارن  $HeH^{2+}$  در نظر می‌گیریم [۳۳]. تابع موج وابسته به زمان از تأثیر عملگر تحول زمانی روی تابع موج حالت پایه حاصل می‌شود و میدان الکتریکی گسیلی مولکول با استفاده از قضیه اهرنست از شتاب دوقطبی الکترون محاسبه می‌شود:

$$a(t) = -\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x, t)|^2 \partial V(x) / \partial x, \quad (3)$$

و از آنجا می‌توان با انجام تبدیل فوریه شتاب دوقطبی، طیف گسیلی را به دست آورد:

#### ۴. پارامترهای بهینه‌سازی

میدان الکتریکی لیزر را مطابق با معادله

$$E_L(t) = E_{L_0} g(t) \cos(\omega_L t + \theta), \quad (15)$$

در نظر می‌گیریم، که تابع پوش لیزر  $g(t)$  با روابط زیر تعریف می‌شود:

$$g(t) = \begin{cases} t(at - at_0 + 1/t_0) & : t < t_0 \\ 1 & : t < T - t_0 \\ (T-t)[a(T-t-t_0) + 1/t_0] & : t - t_0 < t < T \\ 0 & : t > T, \end{cases} \quad (16)$$

که پارامترهای  $t_0, T, a$  و پارامترهای نامعینی هستند که از طریق بهینه‌سازی محاسبه خواهند شد. تابع پوش بی‌ان شده با معادله فوق همواره در شرایط:

$$g(t) = \begin{cases} 0 & : t = 0 \text{ و } T \\ 1 & : t = t_0 \text{ و } T - t_0, \end{cases} \quad (17)$$

صدق می‌کنند. وابستگی پوش به زمان و سه پارامتر مذکور را به صورت  $g(t; a, t_0, T)$  نمایش می‌دهیم. نمای کلی تابع پوش در شکل (۱) دیده می‌شود که شبیه دوزنقه‌ای با قاعده‌های  $T$  و  $T - 2t_0$  است. برای پوش تپ محدودیت‌های زیر را نیز باید در نظر بگیریم: برای ناحیه  $0 < t < t_0$  باید  $0 < g(t) < 1$ . بدین منظور آرگومان بیشینه تابع  $g(t)$  در این بازه را بیشتر از  $t_0$  قرار می‌دهیم. در این صورت  $t_0 > (at_0 - 1) / 2a$ . نامساوی فوق برای مقادیر مثبت  $a$  غیر ممکن است. برای مقادیر منفی  $a$ ،  $at_0^2 > -1$  است و به طور خلاصه  $0 < at_0^2 < -1$ . از طرفی شرط  $t_0 < T/2$  را برای پوش تپ وارد می‌کنیم. جهت وارد کردن محدودیت‌های پوش لیزر در بهینه‌سازی از مجموعه  $(x_0, x_1, x_2)$  استفاده می‌کنیم. بنابراین سه متغیر جدید  $x_0 = at_0^2$  و  $x_1 = t_0/T$  و  $x_2 = T$  را وارد می‌کنیم. بنابراین پارامترهای  $(a, t_0, T)$  طبق معادلات:

$$\begin{cases} a = x_0 / (x_1 x_2)^2, \\ t_0 = x_1 x_2, \\ T = x_2, \end{cases} \quad (18)$$

با  $(x_0, x_1, x_2)$  به هم ارتباط دارند. سایر پارامترهای مورد نظر ما جهت بهینه‌سازی، دامنه میدان الکتریکی لیزر  $E_{L_0}$  و بسامد زاویه‌ای مرکزی صافی طیفی  $\omega_0$  است، که محدودیت مناسبی نیز برای آنها باید در نظر بگیریم.

تابع  $\psi_0(x)$  در معادله (۸) می‌تواند به حالت‌های برانگیخته مولکول منجر شود. می‌توان انرژی حالت پایه مولکول را از معادله:

$$E_0 = \langle \psi_0(x) | -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) | \psi_0(x) \rangle, \quad (11)$$

محاسبه کرد.

#### ۳. روش بهینه‌سازی

همانطور که گفته شده تولید دو تپ کاملاً یکسان را دنبال می‌کنیم. بدین منظور تابع ارزش الگوریتم ژنتیک را به صورت:

$$J = -(F_1 + F_2) / 2F + \alpha |F_1 - F_2| / F + \beta |\Delta\Phi_{CEP}|, \quad (12)$$

تعریف می‌کنیم، که در آن

$$F_i = \int_{\text{ArgMax}[\varepsilon_x(t)] + (i-1)D - \Delta t}^{\text{ArgMax}[\varepsilon_x(t)] + (i-1)D + \Delta t} \varepsilon_x(t) dt, \quad (13)$$

و  $i$  شاخص‌های ۱ و ۲ را اختیار می‌کند و

$$F = \int_{-\infty}^{+\infty} \varepsilon_x(t) dt. \quad (14)$$

پارامتر  $\Delta t$  در معادله (۱۳)، پهنای زمانی تپ آتوانیه مورد نظر و  $D$  فاصله زمانی بین آنها و تابع  $\text{ArgMax}[\varepsilon_x(t)]$  موقعیت زمانی بیشینه پوش میدان تولید شده را نشان می‌دهد. کمیت  $\Delta\Phi_{CEP}$  اختلاف فاز حامل پوش دو تپ است. پارامترهای  $\alpha$  و  $\beta$  در معادله (۱۲) اهمیت نسبی جملات آن را در بهینه‌سازی تعیین می‌کنند. پارامتر  $\alpha$  یکسان شدن دامنه تپ‌ها و  $\beta$  یکسان شدن فاز پوش حامل آنها را در بهینه‌سازی کنترل می‌کند. انتخاب مناسب پارامترهای فوق می‌تواند ما را به تپ‌های مورد نظر هدایت کند. در این کار مقادیر  $\alpha = 2$  و  $\beta = 0.25$  را با انجام بهینه‌سازی مختلف و بررسی نتایج حاصل شده انتخاب کردیم. با بررسی تابع ارزش فوق معلوم می‌شود که جمله اول آن همواره کمتر از  $0.5$  است. بیشینه جملات دوم و سوم نیز صفر هستند. بنابراین عبارت فوق همواره بیشتر از  $0.5$  است و کمترین مقدار آن برای حالت  $F_1 = F_2$  و  $\Delta\Phi_{CEP} = 0$  می‌تواند اتفاق بیفتد که مطلوب مسئله است. شایان ذکر است که هر چه پارامترهای بیشتر و مناسب‌تری در بهینه‌سازی وارد کنیم به کمینه فوق نزدیک‌تر خواهیم شد.

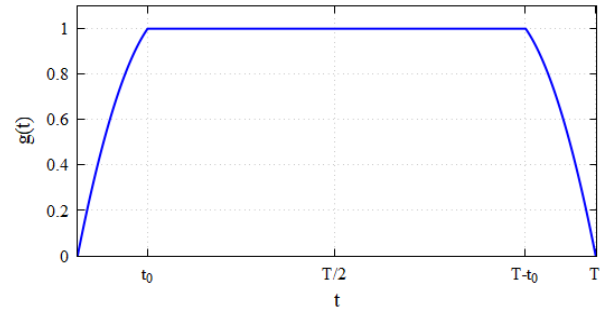
و نزدیک شدن آن به حالت پایه مولکول، دیده می‌شود. حالت پایه مولکول در این شکل با رنگ سبز نمایش داده شده است. موقعیت بیشینه حالت پایه به دلیل عدم تقارن پتانسیل نه در مبدأ مختصات، بلکه نزدیک به  $x = -2 \text{ \AA}$  واقع شده است. در شکل ۳ نمودار تغییرات انرژی پتانسیل مولکول نامتقارن با فاصله بین دو اتم آن به همراه انرژی حالت پایه نشان داده شده است. طبق شکل دوقطبی دائمی مولکول  $HeH^{2+}$  در راستای محور  $x$  قرار دارد [۳۴]. در طی اندرکنش لیزر با مولکول جهت میدان الکتریکی به طور متناوب تغییر می‌کند و به صورت موازی یا پادموازی با جهت دوقطبی دائمی در می‌آید. یونش مولکول در هر دو جهت اتفاق می‌افتد ولی در حالت اخیر بسیار قوی‌تر است. زمانی که میدان الکتریکی پادموازی با دوقطبی دائمی باشد، انرژی الکترون در اثر اندرکنش با میدان لیزر افزایش می‌یابد [۳۳]. بنابراین احتمال یونش و نیز بازده تولید هارمونیک‌ها بالاست. در چرخه بعدی میدان الکتریکی لیزر تغییر علامت داده و با دوقطبی دائمی هم جهت می‌شود. در این حالت انرژی الکترون با انتقال رو به پایین کاهش می‌یابد و بنابراین احتمال یونش و نیز بازده تولید هارمونیک‌ها افت پیدا می‌کند.

به طور خلاصه هدف ما تولید دو تپ آتوانیه با فاز حامل پوش یکسان، پهنای زمانی معین و بسامد مرکزی مشخص است. لازم به ذکر است که پهنای زمانی و طیفی تپ را می‌توان مطابق با دو تعریف متداول انجام داد.

بر طبق تعریف استاندارد آماری، پهنای یک کمیت مانند  $y$  با معادله  $(\Delta y)_{SSD} = \sqrt{\langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2}$  داده می‌شود که برای پهنای زمانی و پهنای طیفی کمیت  $y$ ، به ترتیب روی شدت زمانی و شدت طیفی میانگین‌گیری می‌شود.

در تعریف دیگر، پهنای یک کمیت برابر مقدار کل پهنای نمودار شدت آن در نصف ارتفاع بیشینه‌اش تعریف می‌شود. تعریف اول در محاسبات نظری و تعریف دوم در کارهای تجربی متداول است. می‌توان ارتباط بین دو تعریف فوق را طبق

$$\text{معادله } (\Delta y)_{FWHM} \approx 2/35 (\Delta y)_{SSD} \text{ بیان کرد.}$$



شکل ۱. شکل کلی تابع پوش پالس توصیف شده با معادلات (۱۶) که شبیه دوزنقه‌ای با قاعده‌های به طول  $T$  و  $T-2t_0$  است.

می‌دانیم که طبق مدل نیمه کلاسیکی تولید هارمونیک‌های بالا، بسامد مرکزی صافی طیفی باید کمتر از بسامد قطع هارمونیک‌های تولید شده  $\omega_x$  باشد. با استفاده از این مدل به نامساوی  $\omega_x < 1/\sqrt{4 + 0.8(E_{L_0}/\omega_L)^2}$  می‌رسیم. در اینجا پارامترهای بهینه‌سازی  $x_3 = \omega_L$  و  $x_4 = E_{L_0}/\omega_L$  را وارد می‌کنیم. پارامتر  $x_5$  را نیز جهت بهینه‌سازی فاز میدان الکتریکی لیزر،  $\theta$ ، و  $x_6$  را برای پهنای طیفی صافی  $\Delta\omega$  در نظر می‌گیریم. به طور خلاصه:

$$\begin{cases} \omega_L = x_3, & E_{L_0} = x_4 x_3, \\ \theta = x_5, & \Delta\omega = x_6. \end{cases} \quad (19)$$

با جمع بندی آنچه گفته شد، تابع ارزش،  $J$ ، را می‌توان به صورت تابعی از هفت متغیر  $J(x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8, x_9)$  نوشت. با فرض این که تپ‌های تولید شده نزدیک به تپ‌های گوسی باشند، محدوده پارامتر  $x_6$  قابل محاسبه است. محدوده پهنای طیفی برای ایجاد تپ‌های مطلوب را از رابطه سازگار با اصل عدم قطعیت  $(0.5)/\tau_x \leq \Delta\omega \leq (0.7)/\tau_x$  محاسبه می‌کنیم. بنابراین محدوده بهینه‌سازی پارامترها را می‌توان با معادلات

$$\begin{cases} -1 \leq x_3 \leq 0, & 0.05 \leq x_4 \leq 0.5 \\ 750 \leq x_5 \leq 1600, & 0.5\omega_L \leq x_6 \leq 1/\omega_L \\ 2/3 \leq x_7 \leq 6/0, & 0 \leq x_8 \leq 2\pi \\ 0/2 \leq x_9 \leq 0/28, & \end{cases} \quad (20)$$

خلاصه کرد.

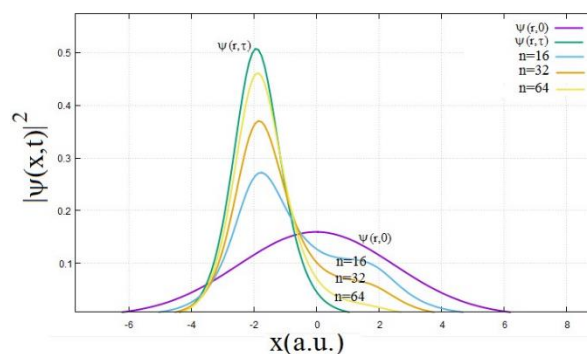
## ۵. نتایج عددی و بحث

در شکل ۲ نحوه تغییرات تابع اولیه انتخاب شده برای  $\psi(x, 0)$  با افزایش تعداد تأثیر عملگر تحول زمانی، پارامتر  $n$  معادله (۹)،

جدول ۱. مقادیر حاصل از بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک برای پارامترهای مسئله، جهت تولید پالس آتوتانیه مطلوب، در این جدول متناظر با طول موج است.

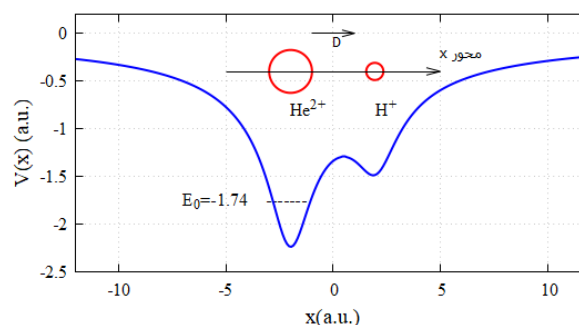
| مقدار بهینه  | کمیت  | مقدار بهینه               | کمیت       |
|--------------|-------|---------------------------|------------|
| $-۰/۵۵۶۸۴۰۷$ | $x_0$ | $-۰/۴۳۲۹۲ \times 10^{-5}$ | $a$        |
| $۰/۱۳۵۱۸۲۲۶$ | $x_1$ | $۴/۷۷$ fs                 | $t_0$      |
| $۱۴۵۸/۲۵۹۸۳$ | $x_2$ | $۳۵/۳$ fs                 | $T$        |
| $۰/۰۳۶۸۹۲۱۳$ | $x_3$ | $۰/۶۴۷۲۳ \omega_0$        | $\omega_L$ |
| $۵/۵۸۱۰۷۲۴۲$ | $x_4$ | $۰/۲۰۶$ a.u.              | $E_{LD}$   |
| $۴/۸۴۷۳۳۵۴۶$ | $x_5$ | $۱/۱۹\pi$                 | $\alpha$   |
| ----         | --    | $۴/۱۲$ fs                 | $T_L$      |

برای تپ‌های تبدیل محدود (گوسی شکل)، رابطه عدم قطعیت طیفی و زمانی یک تپ در تعریف آماری به صورت  $(\Delta t)_{SSD} \times (\Delta \omega)_{SSD} = ۰/۵$  ما در متن حاضر، بدون اشاره صریح، از تعریف آماری پهنای پالس‌ها استفاده خواهیم کرد. مطابق قرارداد فوق پهنای زمانی پالس‌های آتوتانیه را  $\tau_x = ۲/۵ a.u. = ۶۰/۵ as$  و بسامد مرکزی آنها را  $\omega_x = ۶۰ \omega_0$  به عنوان مطلوب مسئله در نظر می‌گیریم، که  $\omega_0 = ۰/۰۵۷ a.u.$  بسامد زاویه‌ای متناظر با طول موج  $۸۰۰ nm$  است یادآوری می‌کنیم که مقدار انرژی برحسب الکترون ولت از معادله  $۲۷/۲ \times E(a.u.)$  قابل محاسبه است. مطابق آنچه گفته شد، برای محاسبه تابع ارزش داده شده با معادله (۱۲) مقدار  $\Delta t$  را برابر با  $۲/۵ a.u.$  (معادل  $۶۰/۵ as$ ) قرار می‌دهیم. همچنین با توجه به هدف تولید پالس‌های دارای فاز پوش - حامل یکسان فاصله زمانی بین پالس‌ها را نیز برابر با دوره تناوب لیزر محرک  $T_L = ۲\pi / \omega_L$  اختیار می‌کنیم [۳۱]. بنابراین بسامد زاویه‌ای مرکزی  $\omega_c = \omega_x = ۶۰ \omega_0$  را در تابع صافی داده شده با معادله (۶) وارد می‌کنیم. حال با توجه به آنچه گفته شد می‌توان تپ آتوتانیه گسیل شده از مولکول را در اندرکنش یک میدان الکتریکی لیزری معین و برای یک پهنای طیفی مفروض برای صافی به دست آورده و تابع ارزش را محاسبه کرد. ما در اینجا نتایج بهینه‌سازی حاصل از الگوریتم ژنتیک با جمعیت  $۶۰$

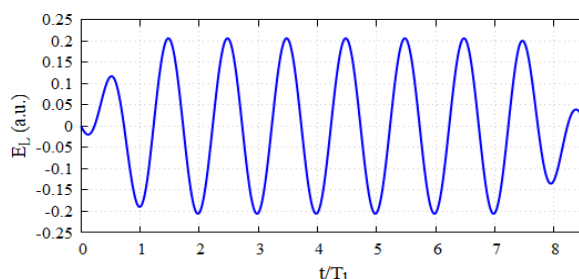


شکل ۲. نمایش تغییرات فضایی تابع موج اولیه انتخاب شده  $\psi(x,0)$  برای تعداد تأثیر عملگر تحول زمانی مختلف  $n = 16, 32, 64$ . مطابق شکل با افزایش  $n$  تابع  $\psi(x,0)$  به حالت پایه نزدیک می‌شود. تابع داده شده با رنگ بنفش تابع دلخواه اولیه،  $\psi(x,0)$  و رنگ سبز ویژه حالت پایه مولکول مورد نظر،  $\psi(x)$ ، را نمایش می‌دهد. لازم به ذکر است که همه نمودارها بهنجار شده هستند، یعنی

$$\int |\psi(x,t)|^2 dx = 1$$



شکل ۳. نمودار تغییرات انرژی پتانسیل مولکول نامتقارن با فاصله بین دو اتم. جهت دو قطبی دائمی مولکول در شکل نمایش داده شده است. جهت میدان الکتریکی در چرخه‌های متوالی نسبت به جهت دو قطبی دائمی مولکول تغییر می‌کند. در شکل انرژی حالت پایه نیز دیده می‌شود.



شکل ۴. نمایش شکل بهینه میدان الکتریکی بر حسب زمان که با استفاده از بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک حاصل شده است. در شکل جهت میدان الکتریکی در چرخه‌های متوالی نسبت به جهت دو قطبی دائمی مولکول تغییر می‌کند. در شکل انرژی حالت پایه نیز دیده می‌شود. در شکل  $T_L = 2\pi / \omega_L = 4/12 fs$  برابر دوره تناوب لیزر محرک است. طول قاعده‌های و بزرگ و کوچک پوش پالس به ترتیب برابر  $۳۵/۳ fs$  و  $۲۵/۷۶ fs$  است.

عضوی را پس از طی حدود ۲۰۰۰ نسل با تابع ارزش حاصل از  $J = -0/220321$  گزارش می‌کنیم.

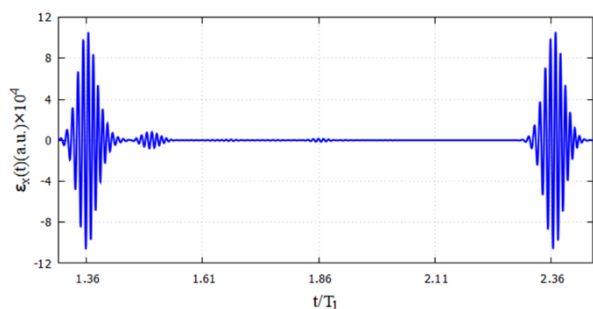
جدول ۱ خلاصه نتایج حاصل از بهینه‌سازی را نشان می‌دهد. در شکل ۴ میدان الکتریکی بهینه شده نمایش داده شده است. محور زمان در این شکل برحسب دوره تناوب لیزر محرک  $(T_L = 2\pi/\omega_L = 4/12\text{fs})$  و طول فاعده بزرگ پوش آن برابر  $35/3\text{fs}$  است. شکل ۵. الف طیف ساختار معمول در فرایند تولید هارمونیک‌ها را نمایش می‌دهد: شدت طیفی برای چند هارمونیک اول افت بسیار سریع را نشان می‌دهد، سپس برای بخش بزرگی از هارمونیک‌ها شدت تقریباً یکسانی دارد که به ناحیه فلات شهرت دارد و در نهایت بعد از بالاترین هارمونیک سریعاً افت می‌کند که بسامد قطع نامیده می‌شود. در شکل ۵. ب شدت طیفی اولیه و صافی شده به ترتیب با نمودار قرمز نقطه چین و آبی توپر نشان داده شده‌اند. با برهم‌نهی بخش صافی شده طیف تپ‌های مطلوب حاصل می‌شوند. این بخش از طیف عمدتاً ناشی از تأثیر قسمت منفی میدان الکتریکی است که در آن میدان الکتریکی در جهت مخالف دو قطبی دائمی مولکول وارد می‌شود. در اثر این بخش از میدان، الکترون از سمت یون هیدروژن تونل زنی کرده و یونیده می‌شود و در بازگشت و برخورد به یون هلیوم تولید هارمونیک‌های بالا را موجب می‌شود. چرخه‌های مثبت میدان الکتریکی سهم بسیار ناچیزی در هارمونیک‌های تولید شده دارند.

شکل ۶ پوش میدان الکتریکی گسیل شده در اثر اندرکنش لیزر بهینه با مولکول دو اتمی مورد نظر را نشان می‌دهد. مطابق شکل دو تپ آتوانیه یکسان با فاصله زمانی  $4/12$  فمتوانیه و برابر دوره تناوب لیزر محرک دیده می‌شوند. می‌دانیم که فاصله زمانی تپ‌های ناشی از اندرکنش لیزر با مولکول‌های تک اتمی نصف دوره تناوب لیزر محرک است و فاز پوش - حامل دو تپ کنار هم در این فرایند یکسان نیست، ولی فاز حامل- پوش تپ‌های تولید شده در فرایند اندرکنش لیزر با یک مولکول نامتقارن یکسان است. در شکل ۷ نقش چرخه مثبت و منفی میدان الکتریکی لیزر در تولید هارمونیک‌های بالا بررسی شده است. بدین منظور اندرکنش ناحیه منفی و مثبت میدان

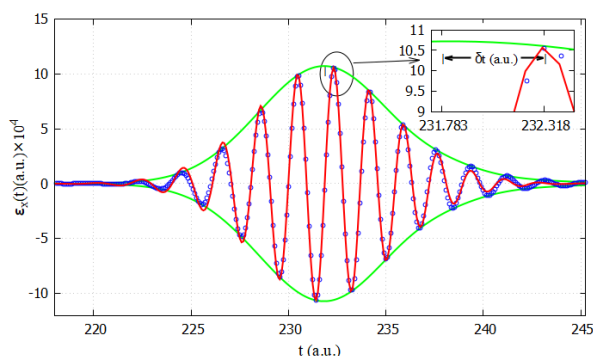
الکتریکی با مولکول به طور جداگانه مورد بررسی قرار گرفته است.

نمودار آبی و قرمز تپ‌های تولید شده را به ترتیب در حالتی نمایش می‌دهند که فقط بخش منفی و مثبت میدان در اندرکنش وارد شده است. نتیجه به دست آمده نشان می‌دهد که دامنه تپ‌های تولید شده در حالت اول به مراتب بزرگ‌تر از حالت دوم هستند. به عبارت دیگر نقش قسمت مثبت میدان الکتریکی لیزر بسیار کمتر از قسمت منفی است. این نتیجه تأیید دیگری بر تأثیر دو قطبی دائمی مولکول در تولید هارمونیک‌ها و شکست تقارن فضایی یونش است.

در اینجا فاز حامل-پوش تپ‌های تولید شده را از نزدیک مطالعه و بررسی می‌کنیم. در شکل ۸ نمودار تغییرات زمانی میدان الکتریکی تپ‌های آتوانیه تولید شده از نمای نزدیک‌تر نشان داده شده است، تا مقایسه فاز پوش-حامل آنها ساده‌تر شود. با توجه به شکل، تشابه کامل تپ‌ها کاملاً آشکار است. همانطور که انتظار می‌رود، فاصله زمانی بین آنها، برابر با دوره تناوب لیزر محرک  $(T_L = 4/12\text{fs})$  است. در شکل ۹ فاز حامل-پوش تپ‌ها با انطباق دادن بیشینه مقدار میدان الکتریکی آنها روی یکدیگر از طریق انتقال تپ سمت راست (نمودار قرمز رنگ توپر) روی تپ سمت چپ (نمودار نقطه چین آبی) بررسی شده است. برای محاسبه فاز پوش حامل تپ‌ها از اختلاف زمانی بیشینه پوش و میدان الکتریکی استفاده می‌کنیم، که در شکل ۹ مشخص شده‌اند. فاز حامل پوش هر دو تپ تولید شده در این شکل با دقتی بسیار بالا برابر با  $\Phi_{CEP} = -1/88877\pi$  است که نشان دهنده دقت و کارایی بالای روش ارائه شده است. پهنای زمانی هر دو تپ تولید شده مقدار  $2/52$  (a.u.) را به دست می‌دهد که با مقدار مورد انتظار اختلاف بسیار ناچیز  $0/8$  درصد را نشان می‌دهد. همچنین پهنای طیفی تپ‌های حاصل برابر  $0/237$  (a.u.) است. حاصلضرب پهنای زمانی و طیفی این تپ‌ها برابر  $0/6$  است که با مقدار مورد انتظار برای تپ‌های کاملاً گوسی  $(0/5)$  تفاوت اندکی نشان می‌دهد. مطابق شکل فوق، انطباق دو تپ در اطراف بیشینه آنها بیشتر است و با حرکت به سمت کناره‌ها به تدریج کاهش می‌یابد.



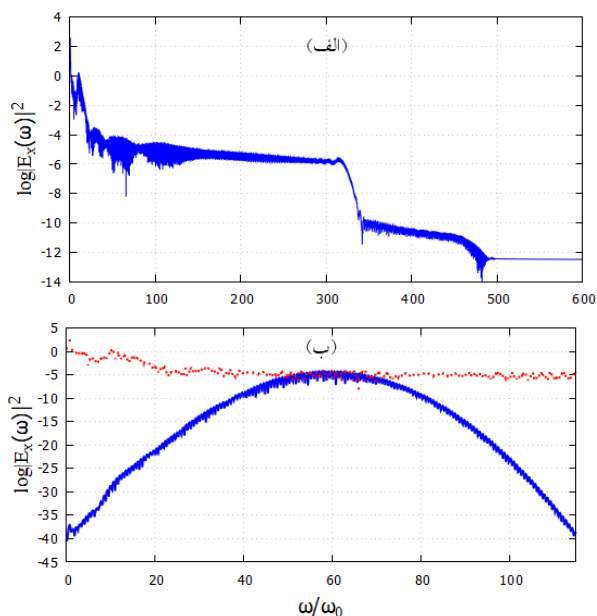
شکل ۸. نمودار تغییرات زمانی تپ‌های یکسان آوتوانیه با مشخصات مطلوب که با استفاده از بهینه‌سازی پارامترهای لیزر محرک حاصل شده‌اند. تشابه کامل دو تپ تولید شده و نیز فاصله زمانی بین آنها، برابر دوره تناوب لیزر محرک در شکل دیده می‌شود.



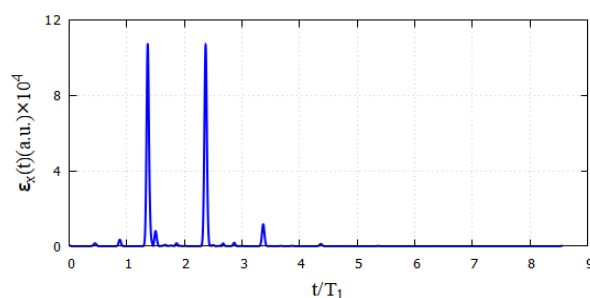
شکل ۹. مقایسه فاز حامل-پوش دو تپ تولید شده با انطباق دادن موقعیت بیشینه میدان الکتریکی آنها روی یکدیگر با انتقال تپ سمت راست (نمودار قرمز رنگ) روی تپ سمت چپ (نمودار با نقاط آبی رنگ). نمودار سبز رنگ پوش تپ‌ها را نمایش می‌دهد. موقعیت بیشینه‌های میدان الکتریکی و پوش تپ و نیز فاصله زمانی آنها ( $\delta t$ ) در شکل نشان داده شده است. انطباق کامل تپ‌ها به ویژه در نزدیکی بیشینه آنها به وضوح دیده می‌شود. فاز حامل پوش هر دو تپ با دقت بسیار مناسبی برابر با  $\Phi_{CEP} = \omega_x \delta t = -1/18777\pi$  رادیان محاسبه شده است.

## ۶. نتیجه‌گیری

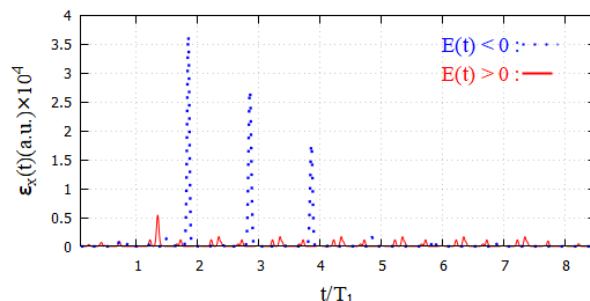
به طور خلاصه، با حل عددی معادله شرودینگر وابسته به زمان، تولید دو تپ آوتوانیه با فاز حامل-پوش یکسان و با فاصله زمانی و دوام زمانی قابل کنترل در اندرکنش لیزر فمتوتوانیه با مولکول نامتقارن  $HeH^{2+}$  را از لحاظ نظری مورد بررسی قرار دادیم. مشخصات تپ لیزر جهت ایجاد تپ‌های فمتوتوانیه مطلوب با استفاده از روش بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک به دست آمدند و تأثیر چرخه مثبت و منفی میدان الکتریکی لیزر در تولید تپ‌های مطلوب مورد مطالعه قرار گرفت. نشان داده شد که تپ‌های آوتوانیه تولید شده با تأخیر زمانی ۴/۱۲ فمتوتوانیه (برابر



شکل ۵. (الف) نمایش شدت طیفی گسیل شده از مولکول قبل از اعمال صافی توسط صافی طیفی که در آن ناحیه تخت طیفی و بسامد قطع دیده می‌شوند. (ب) شدت طیفی بهینه شده قبل از صافی (نمودار قرمز نقطه چین) و بعد از صافی طیفی (نمودار آبی توپر) حول بسامد  $\omega_c = 60\omega_0$ .



شکل ۶. نمایش پوش میدان الکتریکی گسیل شده بر حسب زمان در اثر اندرکنش لیزر محرک بهینه شده با مولکول  $HeH^{2+}$ . فاصله دو تپ تولید شده برابر دوره تناوب لیزر محرک  $T_L = 4/12$  fs فمتوتوانیه در شکل دیده می‌شود.



شکل ۷. بررسی میزان نقش چرخه مثبت و منفی میدان الکتریکی لیزر در تولید هارمونیک‌های بالا و تپ‌های آوتوانیه. نمودار آبی نقطه چین و قرمز توپر به ترتیب تنها با وارد کردن بخش منفی و مثبت میدان الکتریکی لیزر به دست آمده‌اند. با توجه به نتیجه حاصل شده، نقش قسمت منفی میدان الکتریکی در تولید تپ‌های مطلوب کاملاً آشکار است.



تأخیر زمانی قابل کنترل و فاز حامل پوش معین استفاده شود. تولید تپ‌ها به تعداد محدود، به دلیل کنترل دقیق تر بسته‌های موج الکترونی اهمیت بیشتری نسبت به قطار تپ‌ها در کارهای تجربی دارند. با توجه به نتایج حاصل شده، کاربرد تپ‌های حاصل از این روش، ما را به انجام تحقیقات بیشتر در حوزه دینامیک الکترونی در مواد مختلف امیدوارتر می‌کند.

با دوره تناوب لیزر محرک) دوام زمانی  $as/1/60$  و فاز حامل- پوش یکسان ( $1/87877\pi$ ) دارند و با دقت بسیار بالایی با پارامترهای مطلوب همخوانی دارند. انطباق مناسب پارامترهای حاصل شده برای تپ‌های تولید شده با پارامترهای مطلوب نشان دهنده کارایی بسیار بالای روش ارائه شده است. این روش می‌تواند برای تولید تپ‌های با پهنای زمانی دلخواه،

## مراجع

1. G Steinmeyer, D H Sutter, L Gallmann, N Matuschek, and U Keller, *Science*, **286** (1999) 544.
2. M Nisoli *et al.*, *Opt Lett*, **22** (1997) 8.
3. D. J. Jones *et al.*, *Science*, **288** (2000) 5466.
4. Z Chang, "Fundamentals of Attosecond Optics", CRC Press (2011).
5. C Gohle *et al.*, *Nature*, **436** (2005) 7048.
6. G Sansone *et al.*, *Science*, **314** (2006) 5798.
7. Y Jiao, F Wang, X Hong, W Su, and Z Zhang, *Phys. Lett. A*, **378** (2014) 3.
8. M Lewenstein, P Balcou, M Y Ivanov, A L'Huillier, and P B Corkum, *Phys. Rev. A* **49** (1994) 3.
9. I P Prokopovich, *Laser Phys. Lett.* **2** (2005) 5.
10. I Prokopovich, *Laser Phys.* **15** (2005) 6.
11. R A Ganeev, "High order Harmonic Generation in laser Plasma plumes", Imperial college Press (2013).
12. M Cherednychek and A Pukhov, *Quantum Electronics* **46** (2016) 4.
13. S Mondal *et al.*, *Sci. Rep.* **12** (2022) 1.
14. X Lavocat-Dubuis, F Vidal, J P Matte, J C Kieffer, and T Ozaki, *New Journal of Physics* **13** (2011) 2.
15. A Mak *et al.*, *Reports on Progress in Physics* **82** (2019) 2.
16. P M Paul *et al.*, *Science* **292** (2001) 5522.
17. P Antoine, A L'Huillier, and M Lewenstein, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 7.
18. M. Ivanov and P B Corkum, *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 15.
19. H A Navid, R Aghbolaghi, and Z Yarali, *J. Mod. Optics* **66** (2019) 17.
20. Y Hu *et al.*, *Zeitschrift für Naturforschung A* **77** (2022) 10.
21. J-X Du, G-L Wang, X-Y Li, Z-H Jiao, S-F Zhao, and X-X Zhou, *Phys. Rev. A* **108** (2023) 2.
22. A B H Yedder, C Le Bris, O Atabek, S Chelkowski, and A Bandrauk, *Phys. Rev. A* **69** (2004) 4.
23. Z Chang, *Phys. Rev. A* **76** (2007) 5.
24. K Kovács and V Tosa, *Sci Rep* **10** (2020) 1.
25. J Miao *et al.*, *Opt Express* **20** (2012) 5.
26. S Hu and L A Collins, *J. Mod. Optics* **54** (2007) 7.
27. A Baltuška *et al.*, *Nature* **421** (2003) 6923.
28. T Popmintchev, *et al.*, *Nature Photonics* **4** (2010) 12.
29. P B. Corkum and F Krausz, *Nature Physics* **3** (2007) 6.
30. P Lan, P Lu, W Cao, X Wang, and W Hong, *Optics Lett.* **32** (2007) 9.
31. P Lan, P Lu, W Cao, Y Li, and X Wang, *Phys. Rev. A* **76** (2007) 2.
32. X-Y Miao and H-N Du, *Phys. Rev. A* **87** (2013) 5.
33. X-B Bian and A. D. Bandrauk, *Phys. Rev. Lett.* **105** (2010) 9.
34. G L Kamta and A. D. Bandrauk, *Phys Rev Lett.*, **94** (2005) 20.
35. S Majorosi, M G Benedict, and A Czirják, *Phys. Rev. A* **98** (2018) 2.
36. J Javanainen, J H Eberly, and Q Su, *Phys. Rev. A* **38** (1988) 7.
37. Q Su and J H Eberly, *Phys. Rev. A* **44** (1991) 9.

38. A Gordon, R Santra, and F X Kärtner, *Phys. Rev. A* **72** (2005) 6.
39. H Navid and M Keshavarzi, *J. Mod. Optics* **64** (2017) 20.
40. L Lehtovaara, J Toivanen, and J. Eloranta, *J. Comp. Phys.* **221** (2007) 1.