

QUÁ TRÌNH ION HÓA HAI ĐIỆN TỬ CỦA NGUYÊN TỬ HELI BẰNG LASER CƯỜNG ĐỘ CAO XUNG CỰC NGẮN

NGUYỄN ĐỨC THANH TUYÊN*, NGUYỄN NGỌC TÝ**

TÓM TẮT

Chúng tôi khảo sát quá trình ion hóa hai điện tử bằng phương pháp giải số phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian của nguyên tử heli trong trường laser. Kết quả cho thấy khi tăng dần độ dài xung, xác suất ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli tăng dần và tiến tới giá trị bão hòa. Hơn nữa, khi cường độ của laser càng lớn thì xác suất ion hóa và tốc độ tăng của xác suất ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli càng nhanh, điểm bão hòa của quá trình ion hóa càng lùi dần về các chu kỳ cuối của xung.

Từ khóa: nguyên tử heli, ion hóa hai điện tử, laser xung cực ngắn.

ABSTRACT

Double ionization of helium in ultrashort intense laser fields

We investigate the double ionization by numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation of helium in laser fields. Results show that when the laser duration increases, the double ionization probability goes up and reaches a saturation value. In addition, with more intense laser fields, this probability becomes higher and the saturation value occurs latter in the last cycles.

Keywords: helium, double ionization, ultrashort intense laser.

1. Giới thiệu

Ngày nay vật lý nguyên tử - phân tử là một trong những ngành được nghiên cứu rất sôi động vì đây là nguồn cung cấp thông tin về cấu trúc của nguyên tử, phân tử. Đặc biệt, các quá trình tương tác giữa nguyên tử, phân tử với trường bên ngoài là một trong những đề tài nóng bỏng và thu hút sự quan tâm rất lớn của nhiều nhà khoa học. [3,4,12].

Khi nguyên tử, phân tử tương tác với laser cường độ cao và xung cực ngắn, có nhiều hiệu ứng phi tuyến xảy ra. Một trong những hiệu ứng đó là quá trình ion hóa của các nguyên tử, phân tử. Đối với nguyên tử chỉ có một điện tử như hydro, quá trình ion hóa xảy ra khi điện tử bị kéo ra và mất liên kết với hạt nhân. Đối với các nguyên tử có nhiều điện tử, thì sự đóng góp của các điện tử còn lại vào quá trình này phải được kể đến. Do đó việc khảo sát quá trình ion hóa hai điện tử (double ionization) của các nguyên tử có nhiều hơn một điện tử cũng là một vấn đề được quan tâm [5-8]. Heli là nguyên tử có hai điện tử, được các nhà khoa học lựa chọn để bắt đầu cho quá trình nghiên cứu các quá trình ion hóa hai điện tử.

Trong công trình [6], Panfili đã sử dụng hướng tiếp cận cổ điển để khảo sát quá trình ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli khi nguyên tử này tương tác với laser

* GV, Trường Trung học Thực hành, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

** TS, Trường Đại học Sư phạm TPHCM

cường độ cao, xung cực ngắn. Trong công trình [7], các tác giả đã sử dụng các phương pháp gần đúng TDHF, TDDFT để khảo sát các quá trình ion hóa một và hai điện tử của heli và đã đánh giá vai trò của tương quan của các điện tử trong các quá trình ion hóa này. Năm 2000 [5], Lein và các cộng sự đã sử dụng phép biến đổi Wigner, phân tích chuyển động khối tâm của hai điện tử để xác định cơ chế của quá trình ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli. Tiếp theo, đến năm 2010, công trình [8] đã công bố các kết quả nghiên cứu về quá trình ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli bởi các tia hồng ngoại và xung laser cực tím chân không (vacuum ultraviolet - VUV). Các tác giả sử dụng phương pháp Crank-Nicolson để tính xác suất ion hóa một điện tử và ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli, đưa ra các so sánh xác suất ion hóa trong hai trường hợp dùng tia hồng ngoại và laser cực tím chân không ứng với các độ dài xung và các cường độ đỉnh khác nhau. Trong các công trình trên, các tác giả chỉ tính toán xác suất ion hóa một điện tử và ion hóa hai điện tử cho từng trường hợp cường độ và độ dài xung của laser một cách riêng biệt, sự khảo sát quá trình ion hóa hai điện tử ứng với các thông số laser khác nhau là cần thiết. Trong bài báo này, chúng tôi sẽ phân tích ảnh hưởng cụ thể của từng thông số lên quá trình ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli.

Nhằm mục đích trên, để tính xác suất ion hóa hai điện tử, chúng tôi giải số phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian (phương pháp TDSE). Hiện nay, có nhiều nhóm nghiên cứu theo hướng này và đã thu được các kết quả đáng chú ý [9-11]. Tuy nhiên, do nguyên tử, phân tử là hệ nhiều hạt phức tạp và tương tác với trường laser nên việc giải chính xác phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian đòi hỏi rất nhiều tài nguyên máy tính và thời gian tính toán, và như vậy, với cách tiếp cận này, hầu như các nhóm chỉ tập trung nghiên cứu cho các nguyên tử, phân tử đơn giản như H_2 , He [9-11]. Cũng trong khuôn khổ đó, chúng tôi sẽ giới hạn khảo sát cho bài toán heli một chiều.

Bằng cách thay đổi các thông số khác nhau của chùm laser như cường độ, độ dài xung và bước sóng, chúng tôi khảo sát sự phụ thuộc của xác suất ion hóa hai điện tử của heli vào từng thông số.

Bố cục bài báo được chia làm bốn phần chính. Sau phần giới thiệu, trong phần tiếp theo, chúng tôi giới thiệu về phương pháp TDSE cho nguyên tử heli và từ đó tính xác suất ion hóa hai điện tử. Sau đó, trong phần ba, chúng tôi trình bày các kết quả thu được về sự phụ thuộc của xác suất ion hóa hai điện tử với các trường laser khác nhau. Cuối cùng là phần kết luận nơi chúng tôi tóm tắt lại các kết quả đã đạt được.

2. Phương pháp TDSE cho nguyên tử heli

Chúng tôi xét bài toán nguyên tử heli một chiều, với các tọa độ của hai điện tử đối với gốc tọa độ ở hạt nhân là x_1, x_2 . Toán tử Hamilton của nguyên tử heli trong hệ đơn vị nguyên tử ($e = \hbar = m_e = 1$) được viết

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} - \frac{Z}{x_1} - \frac{Z}{x_2} + \frac{1}{|x_1 - x_2|} \quad (1)$$

trong đó $Z = 2$ là điện tích hạt nhân.

Từ đó ta có phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian cho nguyên tử heli khi tương tác với trường laser

$$i \frac{\partial \Psi(x_1, x_2, t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V_C + V_L \right) \Psi(x_1, x_2, t) \quad (2)$$

Để tránh điểm kỳ dị trong thế các Coulomb mô tả tương tác điện tử với hạt nhân và giữa các điện tử với nhau, các hằng số sẽ được thêm vào, lúc này thế được gọi là thế soft-Coulomb. Hằng số thêm vào sao cho năng lượng của hệ ứng với thế soft-Coulomb gần bằng với năng lượng của hệ thực. Đối với nguyên tử heli, chúng tôi lần lượt thêm các hằng số 0.565 và 0.650 vào các thế mô tả tương tác elctron-hạt nhân và điện tử-điện tử. Khi đó thế tương tác Coulomb được viết lại như sau

$$V_C = -\frac{Z}{\sqrt{x_1^2 + 0.565}} - \frac{Z}{\sqrt{x_2^2 + 0.565}} + \frac{1}{\sqrt{|x_1 - x_2|^2 + 0.650}} \quad (3)$$

Khi thế năng tương tác V_L giữa các điện tử với trường laser được biểu thị bởi

$$V_L = (x_1 + x_2) E_0 f(t) \cos(\omega_0 t), \quad (4)$$

với E_0 là cường độ ở đỉnh của điện trường (cường độ điện trường cực đại) của trường laser, $f(t)$ là hàm bao, ω_0 là tần số của xung laser và pha ban đầu của laser bằng không thì nghiệm của (2) được viết dưới dạng

$$\Psi(x_1, x_2, t) = \exp \left[-i \int_0^t \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V_C + V_L \right) dt \right] \Psi(x_1, x_2, t=0), \quad (5)$$

trong đó $\Psi(x_1, x_2, t=0)$ là hàm sóng ban đầu của nguyên tử heli khi chưa tương tác với trường laser được chúng tôi giải phương trình Schrödinger dừng bằng phương pháp thời gian ảo [2].

Từ hàm sóng phụ thuộc thời gian có được, chúng tôi tính các xác suất ion hóa một điện tử và ion hóa hai điện tử. Các miền không gian ứng với nguyên tử trung hòa, các quá trình ion hóa một, hai điện tử được định nghĩa:

- Miền A $\{|x_1|, |x_2| < a\}$, ứng với nguyên tử trung hòa;
- Miền B $\{|x_1| < a, |x_2| \geq a\}$, hoặc $\{|x_1| \geq a, |x_2| < a\}$ ứng với sự ion hóa một điện tử;
- Miền C $\{|x_1|, |x_2| \geq a\}$, ứng với sự ion hóa hai điện tử.

trong đó a là khoảng cách từ hạt nhân của nguyên tử đến vị trí có thể được xem là bắt đầu xảy ra sự ion hóa, giá trị của a được chọn là $a = 20 a.u.$ Để có được giá trị $a = 20 a.u.$ chúng tôi đã tiến hành tính toán với các giá trị a khác nhau và nhận thấy rằng khi a lớn hơn $20 a.u.$ thì giá trị xác suất ion hóa thay đổi không đáng kể. Xác suất ion hóa một và hai điện tử được tính bởi các công thức sau

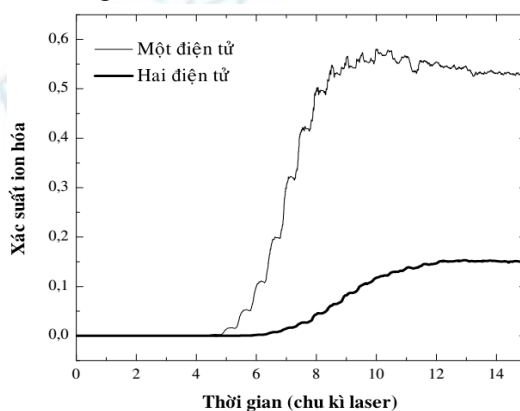
$$P_1(t) = \int_B |\Psi(x_1, x_2, t)|^2 dx_1 dx_2. \tag{6}$$

$$P_2(t) = \int_C |\Psi(x_1, x_2, t)|^2 dx_1 dx_2. \tag{7}$$

3. Kết quả

Trong phần này, chúng tôi sẽ trình bày kết quả về sự phụ thuộc của xác suất ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli vào các thông số: cường độ, độ dài xung và bước sóng của laser.

Sử dụng các công thức tính toán xác suất ion hóa như đã nói ở trên, chúng tôi tính xác suất ion hóa một điện tử và ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli khi tương tác với laser với ba thông số cố định: cường độ $6 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, độ dài xung chứa 15 chu kỳ (tương đương 40fs), bước sóng 800nm.

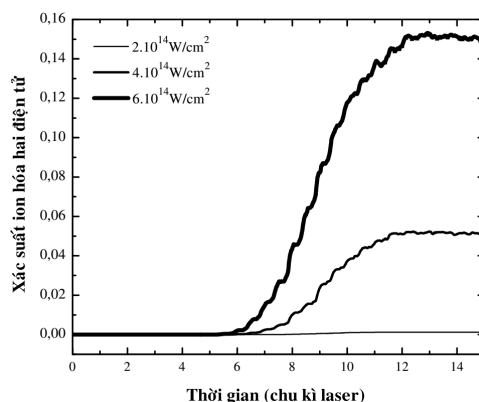


Hình 1. Xác suất ion hóa của nguyên tử heli khi tương tác với laser cường độ $6 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, độ dài xung 40fs và bước sóng 800nm với hai trường hợp: ion hóa một điện tử và ion hóa hai điện tử

Trong hình 1, ta thấy xác suất ion hóa một điện tử có giá trị không đáng kể từ chu kỳ 1-5, nhưng bắt đầu từ chu kỳ thứ 5, xác suất ion hóa một điện tử tăng gần như tuyến tính với tốc độ nhanh. Khi đạt giá trị cực đại, từ chu kỳ 10 đến 15, xác suất ion hóa một điện tử gần như không thay đổi, có biểu hiện giống như một quá trình bão hòa. Quá trình ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli trong trường hợp đang xét có đường biểu diễn giống quá trình ion hóa một điện tử nhưng xác suất ion hóa nhỏ hơn khoảng 4 lần, điều này hoàn toàn phù hợp với các kết quả mà một số tác giả đã công bố [1, 7]. Chúng ta có thể giải thích kết quả trên như sau: do laser bắn vào làm lệch rào thế Coulomb nên nguyên tử bị ion hóa, trước tiên là ion hóa một điện tử. Khi trường laser đạt cường độ đỉnh, xác suất điện tử rời khỏi nguyên tử đạt cực đại, điện tử được gia tốc trong trường laser và thu được vận tốc lớn. Sau nửa chu kỳ quang học, khi trường laser đổi chiều, điện tử có động năng lớn bị kéo ngược trở về với hạt nhân. Khi điện tử quay trở về với hạt nhân mẹ, có thể xảy ra sự tán xạ không đàn hồi, trong đó điện tử trở lại và chạm

thêm vào một điện tử từ nguyên tử làm nguyên tử mất bớt thêm một điện tử đó là sự ion hóa hai điện tử. Quá trình này gọi là sự ion hóa liên tiếp. Khi quá trình điện tử bị bứt ra khỏi nguyên tử cân bằng với quá trình điện tử bị kéo ngược trở về với hạt nhân thì xác suất ion hóa đạt giá trị bão hòa.

Tiếp theo, chúng tôi sẽ khảo sát sự phụ thuộc của xác suất ion hóa hai điện tử vào cường độ của laser ứng với bước sóng 800 nm và độ dài xung 15 chu kỳ. Hình 2 thể hiện kết quả cho các cường độ $2 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, $4 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ và $6 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$. Chúng ta thấy rằng trong các chu kỳ đầu (từ 1 đến 5), xác suất ion hóa không đáng kể. Từ chu kỳ thứ 6, giá trị này tăng dần, cường độ của laser càng lớn thì tốc độ tăng của xác suất ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli càng nhanh. Khi cường độ của laser tăng thì xác suất ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli cũng tăng dần và miền bão hòa của quá trình ion hóa càng lùi dần về các chu kỳ cuối của xung. Cụ thể khi cường độ tăng từ $1 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ lên $6 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ta thấy xác suất ion tăng gần 2000 lần. Điều này có thể giải thích như sau: cường độ của laser tăng dẫn đến tốc độ ion hóa xuyên hầm của điện tử tăng, làm cho xác suất điện tử được tăng tốc ra vùng liên tục lớn, và quá trình tái kết hợp với ion mẹ cũng mạnh hơn, dẫn đến xác suất ion hóa hai điện tử cũng tăng.

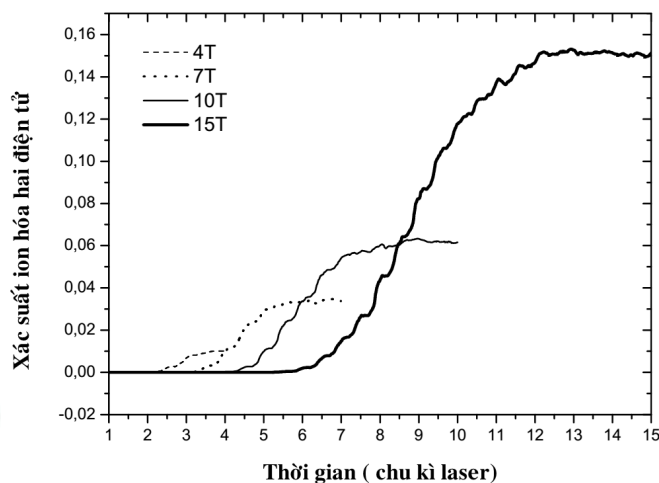


Hình 2. Sự phụ thuộc của xác suất ion hóa hai điện tử của nguyên tử Heli vào cường độ của laser khi tương tác với laser có cường độ thay đổi từ $1 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ đến $6 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, độ dài xung 40fs tương ứng 15 chu kỳ, bước sóng 800nm

Tiếp theo chúng tôi khảo sát sự phụ thuộc của xác suất ion hóa hai điện tử vào độ dài xung của chùm laser khi thay đổi xung chứa từ 1 đến 15 chu kỳ ứng với bước sóng 800nm và cường độ $6 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$.

Chúng tôi nhận thấy trong các trường hợp độ dài xung ngắn (3fs, 5fs, 8fs tương ứng từ 1 đến 3 chu kỳ), xác suất ion hóa hai điện tử gần như bằng không trong phần đầu của xung, sau đó bắt đầu tăng dần ở phần cuối xung nhưng giá trị không đáng kể, xác suất lớn nhất có thể đạt được trong trường hợp 8fs là 0,40%. Khi tăng dần độ dài xung,

xác suất ion hóa hai điện tử tăng dần và bắt đầu xuất hiện quá trình bão hòa. Hình 3 thể hiện xác suất ion hóa hai điện tử với các độ dài xung 7 đến 15 chu kỳ. Ta thấy khi độ dài xung tăng từ 4 chu kỳ lên 15 chu kỳ, xác suất ion hóa hai điện tử tăng từ 1% lên 16%.



Hình 3. Xác suất ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli khi tương tác với laser cường độ $6 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, bước sóng 800nm, và các độ dài xung 4 chu kỳ đến 15 chu kỳ

Để khảo sát sự phụ thuộc của quá trình ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli vào bước sóng của laser, trước tiên chúng tôi chọn laser tương tác có các thông số: cường độ $3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, độ dài xung 40fs (15 chu kỳ), và bước sóng thay đổi từ 400nm đến 1200nm.

Khi thay đổi các giá trị khác nhau của bước sóng laser từ 400nm đến 1200nm, chúng tôi nhận thấy dạng đồ thị của xác suất ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli theo thời gian vẫn không thay đổi. Xác suất ion hóa hai điện tử thay đổi tăng giảm một cách ngẫu nhiên khi tăng dần giá trị của bước sóng của laser. Trong trường hợp laser có cường độ $3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, độ dài xung 40fs (15 chu kỳ), và bước sóng 600nm, xác suất ion hóa hai điện tử đạt giá trị bão hòa lớn nhất là 1,67% và khi laser có cường độ $3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, độ dài xung 40fs (15 chu kỳ), bước sóng 600nm thì xác suất ion hóa hai điện tử đạt giá trị bão hòa nhỏ nhất là 0,77%.

4. Kết luận

Chúng tôi đã sử dụng phương pháp giải số TDSE để khảo sát sự phụ thuộc của xác suất ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli vào các thông số của laser cường độ cao, xung cực ngắn. Quá trình ion hóa một điện tử và ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli có biểu hiện giống nhau: tăng gần như tuyến tính trong các chu kỳ đầu của xung laser và có sự bão hòa ở phần cuối xung. Khi cường độ của laser càng lớn, xác suất ion hóa và tốc độ tăng của xác suất ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli càng lớn, miền bão hòa của quá trình ion hóa càng lùi dần về các chu kỳ cuối của xung. Khi tăng dần

độ dài xung, xác suất ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli tăng dần, tuy nhiên không phải tăng tuyến tính. Xác suất ion hóa hai điện tử của nguyên tử heli thay đổi tăng giảm một cách ngẫu nhiên khi tăng dần giá trị của bước sóng của laser. Trong các công trình tiếp theo, chúng tôi tiếp tục khảo sát quá trình ion hóa hai điện tử của các phân tử có cấu trúc như H_2 .

Ghi chú: Công trình này được thực hiện trong khuôn khổ đề tài nghiên cứu khoa học cấp cơ sở năm 2014 của Trường Đại học Sư phạm TP HCM, mã số CS2014.19.63.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Chen S., Ruiz C., and Becker A. (2010), “Double ionization of helium by intense near-infrared and VUV laser pulses”, *Phys. Rev. A.*, 82, pp. 033426.
2. Kosloff R., Tal-Ezer H. (1986), “A direct relaxation method for calculating eigenfunctions and eigenvalues of the Schrödinger equation on a grid”, *Chem. Phys. Lett.*, 127, pp. 223-230.
3. Kraus P.M., Zhang S.B., Gijsbertsen A., Lucchese R.R., Rohringer N., Wörner H.J. (2013), High-Harmonic Probing of Electronic Coherence in Dynamically Aligned Molecules, *Phys. Rev. Lett.*, 111, pp. 243005.
4. Lein M. (2012), Atomic physics: Electrons get real, *Nature*, 485, pp. 313–314.
5. Lein M., Gross E. K. U. and Engel V. (2000), “Intense-field double ionization of Helium: Identifying the mechanism”, *Phys. Rev. Lett.*, 85, pp. 4707-4710.6
6. Panfili R., Haan S. L., and Eberly J. H. (2002), “Slow-down collisions and nonsequential double ionization in classical simulations”, *Phys. Rev. Lett.*, 89, pp. 113001.
7. Petersilka M. and Gross E. K. U. (1999), “Strong-Field Double Ionization of Helium: A Density-Functional Perspective”, *Laser Physics*, 9, pp. 1-10.
8. Saugout S., Charron E., Cornaggia C. (2008), “ H_2 double ionization with few-cycle laser pulses”, *Phys. Rev. A.*, 77, pp. 023404.
9. Serov V. V., Ivanov I. A. and Kheifets A. S. (2012), “Single-photon double ionization of H_2 away from equilibrium: A showcase of two-center electron interference”, *Phys. Rev. A.*, 86, pp. 025401.
10. Stefanska K., Reynal F. and Bachau H. (2012), “Two-photon double ionization of He ($1s2$) and He ($1s2s$ $1S$) by xuv short pulses”, *Phys. Rev. A.*, 85, pp. 053405.
11. Thriumalai A. and Heyl J. S. (2009), “Hydrogen and helium atoms in strong magnetic fields”, *Phys. Rev. A.*, 79, pp. 012514.
12. Uiberacke M., Uphues Th., Schultze M., et al. (2007), Attosecond real-time observation of electron tunnelling in atoms, *Nature*, 446, pp. 627–632.

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 26-5-2014; ngày phản biện đánh giá: 12-8-2014;
ngày chấp nhận đăng: 20-8-2014)