

Chương trình cải tiến tính toán phổ động lượng của electron dưới tác dụng của laser phân cực tròn

Phạm Nguyễn Thành Vinh

Tóm tắt—Trong bài báo này, chúng tôi giới thiệu một phương án cải tiến chương trình dựa trên lý thuyết đoạn thời gian nhằm giảm thời gian tính toán, từ đó mở rộng tính toán phổ động lượng của electron dưới tác dụng của laser phân cực tròn trong toàn không gian ba chiều. Đây là một bước phát triển của công trình [Phys. Rev. A 92, 043402 (2015)]. Nguyên tử hydrogen và argon đặt dưới tác dụng của xung laser phân cực tròn có độ dài xung nửa chu kỳ được sử dụng để minh họa cho khả năng tính toán của chương trình sau khi được cải tiến. Kết quả cho thấy chương trình cải tiến có thời gian tính toán được giảm đáng kể nhưng vẫn giữ được độ chính xác tương đương với phiên bản chương trình được sử dụng trong các nghiên cứu trước đây.

Từ khóa—Lý thuyết đoạn thời gian, laser phân cực tròn, phổ động lượng

1 MỞ ĐẦU

Một trong những hướng nghiên cứu lớn và cũng là mục tiêu hướng đến của vật lý trường mạnh khi xem xét tương tác của laser với nguyên tử, phân tử là việc chụp ảnh cấu trúc vân đạo nguyên tử, phân tử [1]. Vào năm 2004, J. Itatani và cộng sự đã giới thiệu một bước ngoặt rất lớn trong việc tái tạo cấu trúc vân đạo ngoài cùng của phân tử N_2 khi sử dụng phương pháp chụp ảnh cắt lớp trong không gian tọa độ. Phương pháp này đã được tổng quát hóa bởi C. Vozzi và cộng sự [2] vào năm 2011. Tuy nhiên, việc sử dụng phương pháp này có một nhược điểm là phụ thuộc vào sự lựa chọn thuật toán cắt lớp cũng như mẫu tiêu chuẩn (thường là nguyên tử có cùng năng

lượng ion hóa với hệ đang xét). Do đó, một phương pháp khác đang được kỳ vọng sẽ mang lại thông tin chính xác hơn khi trực tiếp trích xuất thông tin cấu trúc của vân đạo nguyên tử, phân tử từ phổ động lượng của electron ion hóa (PEMD – PhotoElectron Momentum Distribution). Một số kết quả ban đầu đã được công bố như các tính chất của vân đạo phân tử H_2^+ trong phổ động lượng ngang (TMD – Transverse Momentum Distribution) của electron ion hóa [3, 4]; cấu trúc của trạng thái Rydberg trong nguyên tử hydrogen cũng được quan sát trực tiếp từ đo đạc TMD thực hiện bởi nhóm nghiên cứu của M. J. J. Vrakking tại viện Max Planck [5].

Ngoài ra, với sự phát triển của công nghệ chế tạo laser, laser phân cực tròn đang được trông chờ sẽ trở thành một công cụ rất mạnh trong việc chụp ảnh vân đạo nguyên tử, phân tử bởi những nhiễu loạn do sự tái va chạm của electron với ion mẹ có thể được loại bỏ [6]. Do đó electron sau khi bị ion hóa sẽ bay về đầu dò và mang toàn bộ thông tin về cấu trúc của vân đạo mà từ đó nó được thoát ra. Có nhiều cách tiếp cận về mặt lý thuyết để giải quyết bài toán này, trong đó có hai phương pháp thường được sử dụng. Phương pháp thứ nhất dựa vào nghiệm chính xác của phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian (TDSE – Time Dependent Schrödinger Equation) [7]. Mặc dù ưu điểm lớn nhất của TDSE là độ chính xác cao, người sử dụng cần phải có nguồn tài nguyên máy tính rất lớn, đồng thời thời gian tính toán cũng rất dài. Phương pháp thứ hai chiếm ưu thế về thời gian tính toán cũng như dễ dàng theo dõi sự đóng góp của từng quá trình vật lý trung gian vào kết quả cuối cùng là “gần đúng trường mạnh” (SFA – Strong Field Approximation) [8-10]. Tuy nhiên độ

Ngày nhận bản thảo: 04-09-2018, Ngày chấp nhận đăng: 01-10-2018, Ngày đăng: 15-10-2018.

Tác giả Phạm Nguyễn Thành Vinh - Trường ĐH Sư phạm TP.HCM (vinhpn@hcmue.edu.vn)

chính xác và tin cậy của phương pháp này là không cao, và khó có thể đưa vào giải thích các kết quả của thực nghiệm bởi ba nguyên nhân sau: một là phương pháp này bỏ qua tương tác giữa laser với nguyên tử, phân tử khi electron chưa bị ion hóa, do đó sự suy giảm và thay đổi của các trạng thái liên kết không được xét đến; hai là việc bỏ qua tương tác giữa electron và ion mẹ khiến SFA không thể xem xét chính xác trạng thái tán xạ của hàm sóng; cuối cùng mặc dù mang tên gần đúng trường mạnh, nhưng SFA chỉ có thể áp dụng được cho laser có cường độ nhỏ trong vùng ion hóa xuyên ngầm. Từ đó, có một cách tiếp cận mới có thể khắc phục được tất cả khuyết điểm của SFA, cho kết quả chính xác cao tương đương với TDSE và không đòi hỏi cấu hình máy tính cao cũng như thời gian tính toán kéo dài là vô cùng cần thiết. Đó chính là phương pháp tính số dựa trên lý thuyết “đoạn thời gian” (AA – adiabatic theory) được đề xuất bởi nhóm nghiên cứu của T. Morishita [11]. AA có thể được áp dụng cho điện trường có độ lớn bất kỳ với điều kiện là trường laser được sử dụng phải có bước sóng đủ dài, nghĩa là biến thiên chậm theo thời gian. Trong trường hợp của nguyên tử hydro, bước sóng laser có thể áp dụng tốt AA vào khoảng $\lambda \geq 600$ nm [11].

Vào thời điểm hiện tại, lý thuyết đoạn thời gian đã được áp dụng để tính cho hệ nguyên tử hydrogen trong trường hợp laser phân cực thẳng [11] và mở rộng cho laser phân cực tròn [12]. So với TDSE, phương pháp này đã giúp cải thiện được rất đáng kể thời gian tính toán. Thí dụ thay vì cần phải tốn 1 tuần với hệ máy 8 nhân chạy song song khi sử dụng TDSE, việc tính kết quả cho hình số 5 trong công trình [12] chỉ cần tốn khoảng 30 giờ với 1 nhân máy tính khi sử dụng AA [12]. Tuy nhiên, những công trình trước đây [11,12] chỉ tập trung khảo sát cho bài toán hai chiều trong mặt phẳng chứa vector phân cực của laser với độ dài xung laser là một nửa hoặc một chu kỳ quang học. Khi mở rộng tính toán cho không gian ba chiều, đồng thời mở rộng cho laser nhiều chu kỳ quang học, chương trình tính được sử dụng trong công trình [12] sẽ tốn rất nhiều thời gian. Ngoài ra thời gian tính toán sẽ vô cùng lớn

khi mở rộng khảo sát cho các hệ phân tử. Từ đó, việc cải tiến chương trình nhằm rút ngắn thời gian tính toán là vô cùng cần thiết.

Trong bài báo này, chúng tôi đề xuất một ý tưởng đơn giản để cải tiến thuật toán của chương trình nhằm rút ngắn thời gian tính toán và vẫn đảm bảo độ chính xác của kết quả. Để đánh giá mức độ tin cậy của chương trình mới, đồng thời đánh giá khả năng rút ngắn thời gian, chúng tôi xem xét nguyên tử hydrogen và agron đặt trong trường laser phân cực tròn có độ dài nửa chu kỳ và so sánh với kết quả của công trình [12] đối với hydrogen. PEMD của electron ion hóa cũng được mở rộng tính toán trong không gian ba chiều. Đây chính là những mở rộng cần thiết cho những nghiên cứu trước đây [11, 12] trước khi có thể áp dụng khảo sát cho bài toán phân tử. Ngoài ra, sự mở rộng này có ý nghĩa quan trọng đối với thực nghiệm bởi cấu trúc của vân đạo nguyên tử, phân tử có thể ghi nhận được từ PEMD trong mặt phẳng vuông góc với mặt phẳng phân cực của laser [3-5].

2 VẬT LIỆU VÀ PHƯƠNG PHÁP

Đối với một electron tương tác với thế hạt nhân $V(\mathbf{r})$ và được đặt trong trường laser $F(t)$, phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian có dạng (hệ đơn vị nguyên tử được sử dụng trong toàn bộ bài báo này)

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \Delta + V(r) + \mathbf{F}(t)\mathbf{r} \right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

Xung laser phân cực tròn được chọn sao cho vector điện trường nằm trong mặt phẳng oxygen, nghĩa là laser được truyền dọc theo Oz. Khi đó, phương trình mô tả xung laser có dạng:

$$\mathbf{F}(t) = F_0 \exp[-(2t/T)^2] (\mathbf{e}_x \cos \omega t + \mathbf{e}_y \sin \omega t) \quad (2)$$

Cần lưu ý xung laser thỏa mãn điều kiện

$$\mathbf{F}(t \rightarrow \pm\infty) = 0 \quad (3)$$

và được đặc trưng bởi biên độ F_0 , tần số góc ω và độ dài xung T .

Điều kiện ban đầu của phương trình (1) có dạng

$$\psi(\mathbf{r}, t \rightarrow -\infty) = \phi_0(r) \exp(-iE_0 t) \quad (4)$$

Trong đó $\phi_0(\mathbf{r})$ và E_0 lần lượt là hàm sóng và giá trị năng lượng của trạng thái liên kết ban đầu mà từ đó electron bị ion hóa và là nghiệm của phương trình Schrödinger dừng khi chưa bật laser:

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta + V(\mathbf{r}) - E_0\right)\phi_0(\mathbf{r}) = 0, \quad \int \phi_0^2(\mathbf{r})d\mathbf{r} = 1 \quad (5)$$

Theo AA [11], hàm sóng $\psi(\mathbf{r},t)$ trong phương trình (1) có thể được tách ra thành hai thành phần:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \psi_a(\mathbf{r},t) + \psi_r(\mathbf{r},t) \quad (6)$$

với $\psi_a(\mathbf{r},t)$ và $\psi_r(\mathbf{r},t)$ lần lượt là thành phần hàm sóng trực tiếp của electron sau khi bị ion hóa và thành phần tán xạ gây ra bởi quá trình tái va chạm của electron và ion mẹ. Khi sử dụng laser phân cực tròn, xác suất để quá trình tái va chạm này xảy ra là rất nhỏ, do đó số hạng thứ hai trong phương trình (6) có thể được bỏ qua trong những bước tiếp theo để dẫn dắt đến công thức tính PEMD vào thời điểm cuối khi xung laser đã được tắt đi [12].

Quá trình rút ra công thức giải tích của phân bố động lượng được trình bày rất chi tiết trong [11], vì vậy trong bài báo này chúng tôi chỉ tóm tắt lại những kết quả quan trọng tương ứng với chương trình giải số. Thành phần hàm sóng trực tiếp $\psi_a(\mathbf{r},t)$ có thể được viết dưới dạng [11]:

$$\psi_a(\mathbf{r},t) = \phi_0(\mathbf{r};t)\exp[-is_0(t)] \quad (7)$$

trong đó $s_0(t)$ là tác dụng lượng tử và được tính theo công thức

$$s_0(t) = E_0(t) + \int_{-\infty}^t [E_0(t') - E_0]dt' \quad (8)$$

và $\phi_0(\mathbf{r};t)$ chính là trạng thái Siegert dưới tác dụng của điện trường tĩnh có cường độ bằng cường độ điện trường tức thời của xung laser (2). Để thỏa mãn điều kiện ban đầu (4):

$$E_0(t \rightarrow -\infty) = E_0, \quad \phi_0(\mathbf{r};t \rightarrow -\infty) = \phi_0(\mathbf{r}) \quad (9)$$

PEMD được định nghĩa theo công thức:

$$P(\mathbf{k}) = |I(\mathbf{k})|^2 \quad (10)$$

Trong đó $I(\mathbf{k}) = \langle \psi_k^{(-)} | \psi(t \rightarrow \infty) \rangle$ là biên độ phức của PEMD với \mathbf{k} là động lượng và

$\psi_k^{(-)}(\mathbf{r})$ là hàm sóng của electron ở vùng tiệm cận rất xa ion mẹ khi trường laser đã tắt và được chuẩn hóa theo điều kiện

$$\langle \psi_k^{(-)} | \psi_k^{(-)} \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad [12].$$

Tương tự như hàm sóng $\psi(\mathbf{r},t)$, PEMD cũng có thể được tách thành hai thành phần $I(\mathbf{k}) = I_a(\mathbf{k}) + I_r(\mathbf{k})$ tương ứng với tín hiệu ghi nhận được khi electron đến thẳng đầu dò sau khi bị ion hóa và electron đến đầu dò sau khi trải qua quá trình tái va chạm với ion mẹ.

Ngoài ra, trong AA thành phần $I_a(\mathbf{k})$ có thể tính theo dạng tổng quát hoặc dạng giản lược (tương ứng với các phương trình (22) và (30) trong [12]). Cần lưu ý dạng tổng quát của AA chỉ có thể áp dụng được nếu các thông số của trạng thái Siegert bao gồm $\phi_0(\mathbf{r};t)$ và E_0 có thể được tính khi xét điện trường tĩnh có dạng phức [12,13]. Tuy nhiên, cách tính này hiện tại chỉ có thể áp dụng cho nguyên tử hydrogen với cấu trúc các mặt nghiệm phức của trạng thái Siegert là không quá phức tạp, việc mở rộng tính toán cho các hệ phức tạp hơn vẫn chưa được thực hiện. Ngoài ra, các phân tích trong [11, 12] đã chỉ ra rằng đối với laser có bước sóng đủ lớn, cách tiếp cận theo dạng giản lược cho kết quả chấp nhận được khi so sánh với TDSE. Ví dụ độ dài xung từ khoảng $T = 40$ a.u. cho laser nửa chu kỳ tương ứng với bước sóng $\lambda = 580$ nm. Do đó, trong nghiên cứu của chúng tôi khi cải tiến chương trình tính cho AA nhằm áp dụng thống nhất cho các nghiên cứu sau này với những hệ phức tạp hơn, $I_a(\mathbf{k})$ được xét có dạng giản lược như sau:

$$I(\mathbf{k}) = \exp(i\pi/4)(2\pi)^{1/2} \sum_i \frac{A_0(\Delta\mathbf{k}_i; t_i)}{F^{1/2}(t_i)} \times \exp[iS(t_i, \mathbf{k}) - is_0(t_i)] \quad (11)$$

Trong phương trình (11), t_i chính là thời điểm ion hóa của electron sao cho electron đó có thể đạt được động lượng \mathbf{k} vào thời điểm cuối của xung laser và được xác định từ phương trình

$$e(t)\mathbf{u}_i(t, \mathbf{k}) = 0 \quad \rightarrow t = t_i(\mathbf{k}) \quad (12)$$

$A_0(\Delta\mathbf{k}_\perp; t_i)$ chính là biên độ phức của TMD của electron dưới tác dụng của điện trường tĩnh có độ lớn cường độ điện trường bằng đúng giá trị tức thời của điện trường laser vào thời điểm t_i . Quy trình tính số chính xác giá trị của $A_0(\Delta\mathbf{k}_\perp; t_i)$ được trình bày cụ thể trong [13] cho nguyên tử và [3] cho phân tử. Ngoài ra $s_0(t)$ là tác dụng lượng tử được tính theo phương trình (8) và $S(t, \mathbf{k})$ là tác dụng cổ điển có dạng

$$S(t, \mathbf{k}) = \frac{1}{2} \mathbf{k}^2 t - \frac{1}{2} \int_t^\infty [\mathbf{u}_i^2(t', \mathbf{k}) - \mathbf{k}^2] dt' \quad (13)$$

trong đó vector $\mathbf{u}_i(t, \mathbf{k})$ là giá trị động lượng ban đầu của electron vào thời điểm t sao cho động lượng của electron đang xét đạt giá trị \mathbf{k} khi laser được tắt đi ($t \rightarrow \infty$).

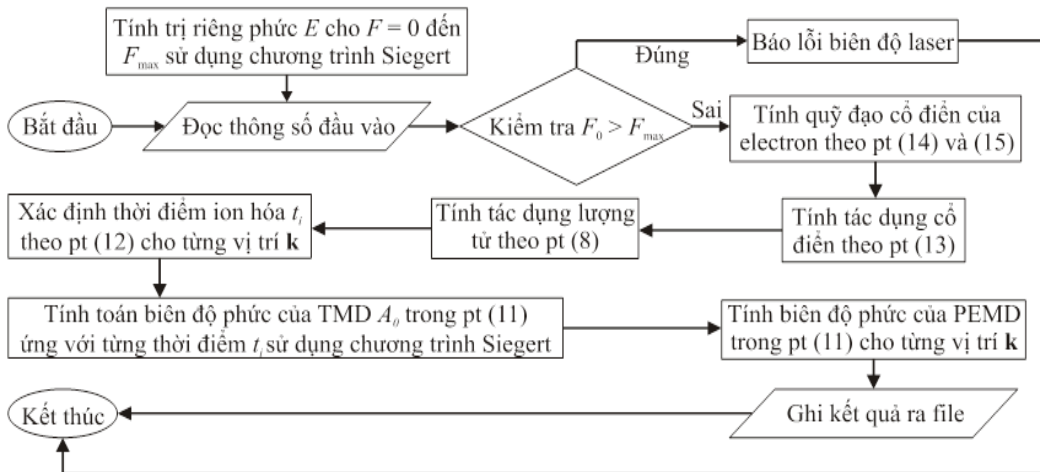
$$\mathbf{u}_i(t, \mathbf{k}) = \mathbf{k} - \mathbf{k}_a(t) \quad (14)$$

với $\mathbf{k}_a(t) = \mathbf{v}_\infty - \mathbf{v}(t)$. $\mathbf{v}(t)$ được xem là động lượng cổ điển thể hiện sự chuyển động của một electron dưới tác dụng của điện trường $\mathbf{F}(t)$

$$\mathbf{v}(t) = -\int_{-\infty}^t \mathbf{F}(t') dt', \quad \mathbf{v}(t \rightarrow \infty) = \mathbf{v}_\infty \quad (15)$$

3 KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Mục tiêu chính trong bài báo này là cải tiến chương trình dựa vào AA đang được sử dụng trong các công trình [11,12] để giảm thời gian tính toán nhưng vẫn giữ được độ chính xác, từ đó có thể mở rộng cho việc xem xét PEMD trong toàn không gian động lượng ba chiều. Cấu trúc của chương trình hiện tại được phân tích và thể hiện trong hình 1.



Hình 1. Cấu trúc chính của chương trình được sử dụng trong các công trình [11,12]

Bước đầu tiên, chương trình tính trị riêng phức E của trạng thái Siegert dưới tác dụng của điện trường tĩnh $F = 0 \rightarrow F_{\max}$ với F_{\max} được chọn tùy ý sao cho $F_{\max} \geq F_0$ là biên độ điện trường của laser được sử dụng. Sau khi đọc thông số đầu vào liên quan đến các tham số của laser, vùng không gian động lượng cần tính toán, chương trình sẽ tái kiểm tra điều kiện của F_0 để chắc

chắn $F_{\max} \geq F_0$. Sau khi đã có đủ thông tin đầu vào, chương trình tiến hành tính toán quỹ đạo cổ điển của electron dựa vào thuật toán Runge-Kutta [14] để xác định những đại lượng trong các phương trình (14) và (15). Từ đó, tác dụng cổ điển và lượng tử tương ứng trong phương trình (13) và (8) được tính toán. Tiếp theo, chương trình sẽ rà soát từng điểm tọa độ \mathbf{k} trong không gian động lượng để xác định thời điểm ion hóa t_i theo

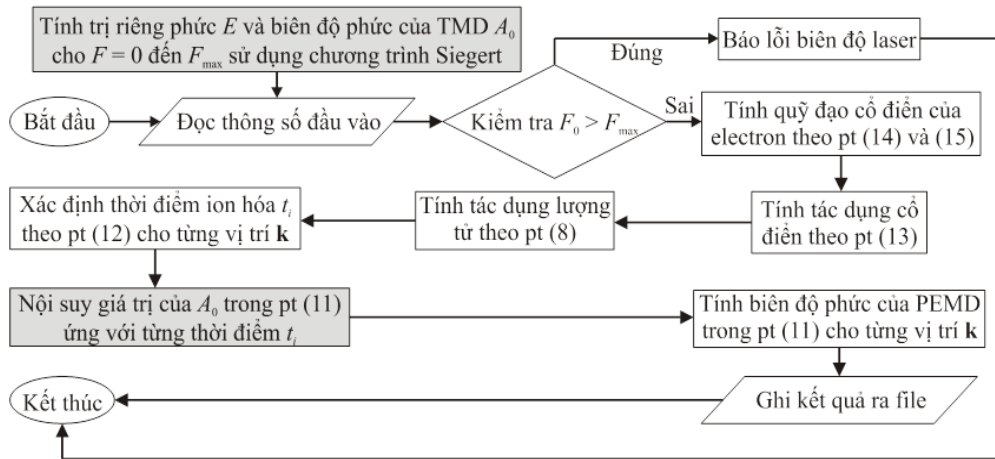
phương trình (12). Cần lưu ý rằng số lượng nghiệm của phương trình (12) tùy thuộc vào vị trí của \mathbf{k} và số chu kỳ laser được sử dụng. Số lượng nghiệm này tăng lên khi chu kỳ laser càng lớn.

Việc xác định thời điểm ion hóa t_i tương ứng với \mathbf{k} có ý nghĩa quan trọng trong các bước tính toán tiếp theo bởi tất cả những thông số cần thiết của laser ứng với thời điểm t_i như độ lớn tức thời của điện trường, pha ban đầu của laser đều dễ dàng nhận được từ phương trình (2). Bước chuẩn bị cuối cùng chính là tính biên độ phức $A_0(\Delta\mathbf{k}_\perp; t_i)$ của TMD ứng với từng giá trị của t_i . Các thông số cần thiết dùng để tính $A_0(\Delta\mathbf{k}_\perp; t_i)$ bao gồm độ lớn của điện trường $F(t_i)$ và $\Delta\mathbf{k}_\perp$ đều đã được suy ra khi biết t_i . Cuối cùng, chương trình tổng hợp tất cả những đại lượng trung gian để tính biên độ phức của PEMD theo phương trình (11) và suy ra PEMD theo phương trình (10).

Trong cấu trúc của chương trình, phần tốn nhiều thời gian nhất chính là quá trình tính toán biên độ phức $A_0(\Delta\mathbf{k}_\perp; t_i)$ ứng với từng thời điểm t_i . Ngoài ra, việc tính $A_0(\Delta\mathbf{k}_\perp; t_i)$ bị lặp lại trong những lần chạy chương trình khác nhau. Do đó, hiệu năng tính toán của chương trình vẫn còn thấp, chỉ phù hợp khi xem xét hệ đơn giản nhất là nguyên tử hydrogen. Đối với những hệ nguyên tử lớn hơn như các nguyên tử khí hiếm hoặc thậm chí là các hệ phân tử, thời gian tính là quá lớn dẫn đến tiến độ nghiên cứu bị trì trệ. Như vậy, để giảm thời gian tính toán của chương trình, bước tính $A_0(\Delta\mathbf{k}_\perp; t_i)$ cần phải cải tiến. Để tránh nhầm lẫn, từ đây trở đi chúng tôi gọi phiên bản chương

trình hiện tại là CP (Current Program) và chương trình được cải tiến là IP (Improved Program).

Từ những phân tích trên, chúng tôi tập trung cải tiến chương trình tại bước tính $A_0(\Delta\mathbf{k}_\perp; t_i)$. Cần lưu ý $A_0(\Delta\mathbf{k}_\perp; t_i)$ là một hàm phụ thuộc vào ba yếu tố Δk_\perp , φ_k , và F lần lượt là độ lớn của động lượng ngang, góc phương vị trong không gian động lượng với $\Delta\mathbf{k}_\perp = (\Delta k_\perp \cos \varphi_k, \Delta k_\perp \sin \varphi_k)$, và độ lớn của điện trường tĩnh. Trong chương trình cải tiến, cả trị riêng phức $E(F)$ và $A_0(F, \Delta k_\perp, \varphi_k)$ được chuẩn bị trước dựa vào chương trình tính toán trạng thái Siegert [3,13] dưới dạng ma trận, với $E(F)$ là ma trận hai chiều $[F, E]$ và $A_0(F, \Delta k_\perp, \varphi_k)$ là ma trận bốn chiều $[F, \Delta k_\perp, \varphi_k, A_0]$. Sau đó, IP sẽ đọc và lưu lại toàn bộ ma trận dữ liệu của $E(F)$ và $A_0(F, \Delta k_\perp, \varphi_k)$ ngay từ bước đầu tiên, đồng thời sử dụng thuật toán nội suy bicubic spline [14] để nội suy ra giá trị của E và $A_0(\Delta\mathbf{k}_\perp; t_i)$ tương ứng với $\Delta\mathbf{k}_\perp = \mathbf{k} - \mathbf{k}_a(t_i)$ và $F(t_i)$. Như vậy, IP chính là tính toán gần đúng của CP dựa vào bộ số liệu sẵn có, do đó để đạt được sự chính xác cao trong quá trình nội suy, số điểm lưới được chọn khi xây dựng ma trận đầu vào phải đủ lớn. Điều này dễ dàng được thực hiện và không chiếm quá nhiều thời gian khi sử dụng chương trình tính trạng thái Siegert [3,13], đồng thời chỉ cần tính một lần duy nhất cho một hệ xác định. Cấu trúc của IP được mô tả trong hình 2.



Hình 2. Cấu trúc chính của IP. Những phần đã cải tiến được đánh dấu bởi nền nâu

Để kiểm chứng sự hiệu quả của IP, chúng tôi tiến hành tính toán cho trường hợp đơn giản nhất là nguyên tử hydro bằng cả IP và CP. Thế năng tương tác được chọn có dạng thống nhất với những tính toán trong [11,12]

$$V(r) = -\frac{\exp[-(r/10)^2]}{r} \quad (16)$$

Khi đó, trạng thái cơ bản $1s$ của nguyên tử hydrogen khi chưa có điện trường ngoài có năng lượng liên kết $E_0 = -0.485483$. Chúng tôi tiến hành tính toán khi đặt nguyên tử hydrogen dưới tác dụng của trường laser có biên độ $F_0 = 0.07$ a.u. (tương ứng với cường độ $I = 3.51 \times 10^{14}$ W/cm²), độ dài xung nửa chu kỳ với $T = 40$ a.u., tần số góc $\omega = \pi/T = 0.079$ a.u. (bước sóng $\lambda \approx 580$ nm). PEMD được tính trong mặt phẳng (k_x, k_y) với $k_x \in [-2.5, 0.5]$ và $k_y \in [-2.0, 0.5]$ tương ứng với số điểm lưới được chọn là 100×80 . Tổng số nghiệm của phương trình (12) cho toàn mặt phẳng (k_x, k_y) là $N_{t_i} = 9267$. Do thời gian sử dụng để tính toán cho các bước còn lại là như nhau giữa CP và IP, thời gian tính toán t_c được xét tương đương với thời gian của bước tính biên độ $A_0(\Delta \mathbf{k}_\perp; t_i)$ nhằm thể hiện rõ sự cải tiến và được thể hiện trong bảng 1.

Bảng 1. Thời gian tính toán t_c

Hệ xem xét	$N_{k_x} \times N_{k_y}$	N_{t_i}	t_c (s)	
			CP	IP
Nguyên tử hydro	100×80	9267	63589	23
Nguyên tử hydro	250×200	57354	396086	24
Nguyên tử argon (*)	250×200	57354	≈ 1987156	23
Nguyên tử argon	250×1	255	9940	4

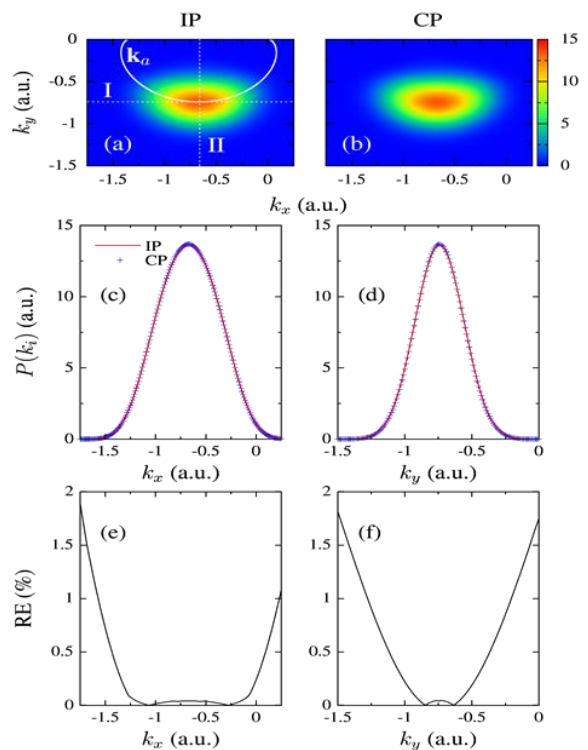
(*) dự đoán thời gian tính

Như thể hiện trong Bảng 1, khi số điểm lưới là 100×80 , CP cần 63589 s ≈ 17.7 h để hoàn thành việc tính toán, IP chỉ cần 23s. Khi số điểm lưới được tăng lên đến 250×200 nhằm tăng độ phân giải của PEMD, $N_{t_i} = 57354$ và CP cần sử dụng khoảng 396086s ≈ 110 h ≈ 4.58 ngày để tính toán trong khi thời gian tính khi sử dụng IP hầu như không thay đổi, chỉ xấp xỉ 24 s. Cần lưu ý rằng, những kiểm chứng nêu trên đều là những tính toán trong mặt phẳng (k_x, k_y) , khi mở rộng ra cho toàn không gian ba chiều (k_x, k_y, k_z) thì thời gian tính khi sử dụng CP sẽ tăng tỷ lệ thuận với số điểm lưới được sử dụng trên trục k_z . Chúng tôi cũng đưa ra dự đoán về thời gian tính toán khi mở rộng xem xét cho nguyên tử phức tạp hơn như nguyên tử argon dưới tác dụng của cùng xung

laser. Để nhận được giá trị $A_0(\Delta\mathbf{k}_\perp; t_i)$ có độ hội tụ cao thì số hệ hàm cơ sở sử dụng để khai triển hàm sóng không thay đổi nhưng số hạng trong khai triển hàm sóng Siegert [13] phải tăng khoảng 15 lần. Khi này thời gian tính cho mỗi bước ứng với nguyên tử argon tăng khoảng 5 lần so với nguyên tử hydrogen, vào khoảng $1987156s \approx 552h \approx 23$ ngày. Việc sử dụng nguyên tử argon có ý nghĩa khẳng định lại kết luận về tính hiệu quả của IP nên chúng tôi chỉ khảo sát PEMD dọc theo trục k_x và đi qua điểm $k_{ax}(0)$ (đường đứt nét màu trắng trong hình số 3) với số điểm lưới 250×1 , khi đó CP tính hết $9940s \approx 2.76h$, và IP chỉ cần khoảng 4s để hoàn thành việc tính toán. Những kết quả trên đã khẳng định sự vượt trội của IP so với CP về mặt thời gian tính toán.

Tiếp theo, kết quả tính toán khi sử dụng IP được so sánh với CP để phân tích độ chính xác của IP bởi đây là tiêu chuẩn chính đánh giá mức độ tin cậy của IP nhằm áp dụng cho những hệ phức tạp hơn trong các nghiên cứu sau này. Hình 3 mô tả PEMD của nguyên tử hydrogen dưới tác dụng của laser nửa chu kỳ với các thông số như đã được trình bày ở phần trên. Trong hình 3a và 3b, PEMD được tính trên toàn mặt phẳng (k_x, k_y) khi $k_z = 0$, đây cũng chính là mặt phẳng phân cực của trường laser. Trong hình 3a, đường cong liền nét màu trắng thể hiện quỹ đạo cổ điển của electron $\mathbf{k}_a(t_i)$. Kết quả cho thấy PEMD được phân bố theo dạng hình xuyên bao quanh đường liền nét màu trắng trong Hình 3a. Ngoài ra, hình 3c và 3d cũng thể hiện PEMD dọc theo đường cắt đi qua $\mathbf{k}_a(0) = (-0.67, -0.74)$ (hai đường đứt nét màu trắng trong hình 3a) cho IP và CP nhằm dễ dàng hơn trong việc so sánh. Kết quả cho thấy tính toán từ IP hoàn toàn trùng khớp với CP với sai số tương đối giữa hai phương pháp luôn nhỏ hơn 2% trong miền được khảo sát ở hình 3c và 3d (xem hình 3e và 3f). Ngoài ra độ sai lệch tương đối (RE – Relative Error) giữa IP và CP trong toàn mặt phẳng (k_x, k_y) cũng đã được tính toán và luôn nhỏ hơn 2% như đã thể hiện cho hai đường cắt đại diện I và II. Cần lưu ý rằng CP luôn cho kết quả chính xác hơn bởi CP tính trực tiếp

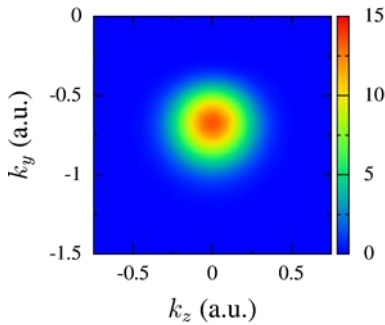
biên độ $A_0(\Delta\mathbf{k}_\perp; t_i)$ từ trạng thái Siegert [3,13], còn IP trích xuất biên độ $A_0(\Delta\mathbf{k}_\perp; t_i)$ từ một ma trận dữ liệu đầu vào dựa trên phép nội suy bicubic spline [14]. Sự sai lệch này là điều không thể tránh khỏi và có thể được làm giảm đi một cách dễ dàng bằng cách tăng số điểm lưới trong ma trận dữ liệu đầu vào của $A_0(\Delta\mathbf{k}_\perp; t_i)$ như đã phân tích ở phần trên. Độ sai lệch 2% chính là sự xác nhận rằng dữ liệu đầu vào mà chuẩn bị đã đủ số điểm lưới cần thiết để thu được kết quả có độ tin cậy cao.



Hình 3. PEMD của nguyên tử hydro được đặt dưới tác dụng của laser phân cực tròn nửa chu kỳ có $F_0 = 0.07$ a.u., $\omega = 0.079$ a.u., và $T = 40$ a.u. khi tính bằng IP (hình a) và CP (hình b) trong mặt phẳng (k_x, k_y) khi $k_z = 0$. Trong Hình a, đường cong liền nét màu trắng thể hiện quỹ đạo cổ điển $\mathbf{k}_a(t_i)$ của electron, hai đường đứt nét màu trắng tương ứng với trường hợp $k_{ax}(0)$ (I) và $k_{ay}(0)$ (II). Hình c và d tương ứng với PEMD dọc theo đường I và II. Hình e và f thể hiện sai số tương đối giữa IP so với CP tương ứng với hình c và d.

Việc giảm rất đáng kể thời gian tính toán giúp chúng tôi dễ dàng mở rộng tính toán PEMD từ hai chiều trong mặt phẳng phân cực của laser sang

toàn miền không gian ba chiều. Hình 4 mô tả PEMD trong mặt phẳng (k_y, k_z) chứa đường đứt nét số 2 trong hình 3a, nghĩa là đi qua điểm $k_{ax}(0) = -0.67$. Trong mặt phẳng (k_y, k_z) không có sự tác động của ngoại lực nên PEMD trong mặt phẳng này chính là TMD và được kỳ vọng chứa đựng rất nhiều thông tin về cấu trúc của vân đạo nguyên tử, phân tử mà từ đó electron bị ion hóa bởi trường laser [3-5]. Ngoài ra, việc đo đạc PEMD trên mặt phẳng này bằng thực nghiệm hoàn toàn có thể được thực hiện trong thời gian ngắn sắp tới với sự phát triển của công nghệ đo đạc. Do đó việc mở rộng tính toán có ý nghĩa rất quan trọng trong việc tạo nền móng lý thuyết cho phân tích thực nghiệm. Hình 4 cho thấy PEMD trong mặt phẳng (k_y, k_z) là những đường tròn đồng tâm thể hiện tính chất đối xứng cầu của trạng thái 1s của nguyên tử hydrogen.



Hình 4. PEMD trong mặt phẳng (k_y, k_z) chứa đường II trong Hình 3a khi nguyên tử hydro được đặt dưới laser được sử dụng trong Hình 3

Cuối cùng, chúng tôi mở rộng tính toán cho nguyên tử argon. Khi này thế năng tương tác $V(r)$ trong gần đúng một điện tử hoạt động có dạng:

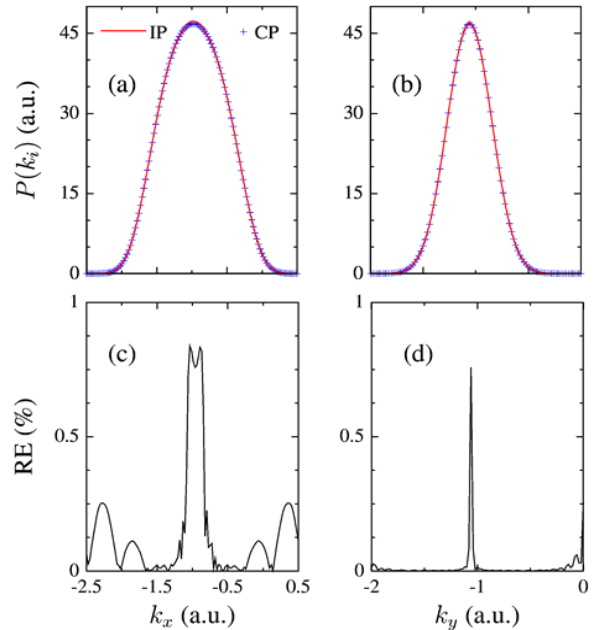
$$V(r) = -\frac{Z_{eff}(r)}{r}, \quad (17)$$

Trong đó giá trị biểu kiến $Z_{eff}(r)$ là một hàm phụ thuộc vào bán kính r và được đề xuất bởi [15, 16]:

$$Z_{eff}(r) = N - (N - 1) \left\{ 1 - [(b/a)(e^{ar} - 1) + 1]^{-1} \right\} \quad (18)$$

Với N là giá trị điện tích của hạt nhân tương ứng. Trong nghiên cứu này, chúng tôi quan tâm

đến electron hoạt động nằm ở phân lớp ngoài cùng, tương ứng với lớp $3p$ với số lượng tử từ luôn nhận giá trị $m = 0$. Bộ thông số (a, b) được sử dụng trong tính toán là $(1.704, 2.0810)$. Khi đó, năng lượng ion hóa của electron ở trạng thái đang xét là 0.579069 , trùng khớp với các kết quả của [17]. Nguyên tử argon được đặt dưới sự tác dụng của xung laser có thông số tương tự với trường hợp của hydrogen. Về mặt thời gian tính toán, IP đã thể hiện sự vượt trội so với CP như phân tích ở trên. Hình 5 cho thấy kết quả tính PEMD dọc theo hai đường cắt trong hình 3a (hình 5a và 5b lần lượt tương ứng với đường cắt I và II) là như nhau đối với IP và CP. Độ lệch tương đối RE giữa hai kết quả vẫn luôn nhỏ hơn 1% (hình 5c và 5d). Đây chính là sự tái khẳng định độ tin cậy của IP. Từ đó có thể kết luận IP là đủ tin cậy để tính toán cho những hệ phức tạp hơn hoặc xem xét bài toán cần độ phân giải của PEMD lớn.



Hình 5. PEMD của nguyên tử argon được đặt dưới tác dụng của xung laser được sử dụng trong hình 3 tương ứng với đường cắt dọc theo $k_{ax}(0)$ (Hình a) và $k_{ay}(0)$ Hình b; Hình c và d thể hiện sai số tương đối giữa IP so với CP tương ứng với hình a và b

Ngoài ra biểu hiện của PEMD đối với nguyên tử argon là tương tự như với nguyên tử hydro. Nguyên nhân là do laser được sử dụng có biên độ điện trường yếu $F_0 = 0.07$ a.u. tương ứng với

hiệu ứng ion hóa xuyên ngầm của electron. Do đó vân đạo nguyên tử không bị nhiễu loạn mạnh thể hiện ở việc TMD (Hình 3d và 5b) có dạng phân bố Gauss. Khi tăng F_0 sao cho electron bị ion hóa theo hiệu ứng vượt rào, vân đạo nguyên tử được dự đoán sẽ bị nhiễu loạn rất mạnh, ảnh hưởng đến sự phân bố của electron bên trong vân đạo, và TMD sẽ không còn giữ được dạng phân bố Gauss [3,13]. Từ đó PEMD được dự đoán sẽ có biểu hiện khác đi rất nhiều so với những kết quả được trình bày trong bài báo này. Những khảo sát này sẽ được xem xét trong nghiên cứu tiếp theo của chúng tôi.

4 KẾT LUẬN

Trong bài báo này, chúng tôi đã đề xuất một giải pháp dù đơn giản nhưng có hiệu quả rất cao trong việc cải tiến chương trình tính toán dựa vào AA nhằm xem xét PEMD của nguyên tử dưới tác dụng của trường laser phân cực tròn. Kết quả khảo sát cho thấy thời gian tính toán được rút ngắn rất đáng kể. Nguyên nhân là do trong IP $A_0(\Delta \mathbf{k}_\perp; t_i)$ được trích xuất dựa vào phương pháp nội suy từ một dữ liệu sẵn có thay vì được tính chính xác cho từng điểm trong CP. Bộ dữ liệu này chỉ cần chuẩn bị một lần cho mỗi hệ xác định. Kết quả phân tích cũng cho thấy việc rút ngắn thời gian không ảnh hưởng đến tính chính xác và độ tin cậy của IP so với CP khi sai lệch tương đối giữa hai phiên bản này luôn nhỏ hơn 2%. Đây chính là một tiền đề có ý nghĩa rất lớn trong việc mở rộng khảo sát PEMD trong toàn miền không gian ba chiều cũng như cho những hệ lớn hơn như phân tử trong những nghiên cứu tiếp theo.

Lời cảm ơn: Đề tài này được tài trợ kinh phí bởi trường Đại học Sư phạm TP.HCM dưới hình thức đề tài khoa học và công nghệ cấp trường mã số CS.2017.19.51.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Y. Lan, S.L. Chung, J. Jiun-San Shen et al. J. Itatani, J. Levesque, D. Zeidler, N. Hiromichi, H. Pepin, J.C. Kieffer, P.B. Corkum, D.M. Villeneuve, Tomographic image of molecular orbital, *Nature* 432, 867, 2004.
- [2]. C. Vozzi, M. Negro, F. Calegari, G. Sansone, M. Nisoli, S. De Silvestri, S. Stagira, Generalized molecular orbital tomography, *Nature* 7, 2029, 2011.
- [3]. V.N.T. Pham, O.I. Tolstikhin, T. Morishita, "Molecular Siegert states in an electric field. II. Transverse momentum distribution of the ionized electrons", *Physical Review A* 89, 033426, 2014.
- [4]. I. Petersen, J. Henkel, M. Lein, Signatures of molecular orbital structure in lateral electron momentum distributions from strong-field ionization, *Physical Review Letter*, 114, 103004, 2015.
- [5]. A.S. Stodolna, A. Rouze, F. Lepine, S. Cohen, F. Robicheaux, A. Gijsbertsen, J. H. Jungmann, C. Bordas, M.J.J. Vrakking, Hydrogen atoms under magnification: direct observation of the nodal structure of stark states, *Physical Review Letter* 110, 213001 (2013).
- [6]. P.L. He, N. Takemoto, F. He, Photoelectron momentum distributions of atomic and molecular systems in strong circularly or elliptically polarized laser fields, *Physical Review A* 91, 063413, 2015.
- [7]. T. Morishita, A.T. Le, Z. Chen, C.D. Lin, Accurate retrieval of structural information from laser-induced photoelectron and high-order harmonic spectra by few-cycle laser pulses, *Physical Review Letters* 100, 013903, 2008.
- [8]. L.V. Keldysh, Ionization in the field of a strong electromagnetic wave, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 47, 1945, Sov. Phys. JETP 20, 1307, 1965.
- [9]. F. H. M. Faisal, Multiple absorption of laser photons by atoms, *Journal of Physics B* 6, L89, 1973.
- [10]. H.R. Reiss, Effect on an intense electromagnetic field on a weakly bound system, *Physical Review, A* 22, 1786, 1980.
- [11]. O.I. Tolstikhin, T. Morishita, Adiabatic theory of ionization by intense laser pulses: Finite-range potentials, *Physical Review A* 86, 043417, 2012.
- [12]. M. Ohmi, O. I. Tolstikhin, T. Morishita, Analysis of a shift of the maximum of photoelectron momentum distributions generated by intense circularly polarized pulses, *Physical Review A* 92, 043402, 2015.
- [13]. P.A. Batishchev, O.I. Tolstikhin, T. Morishita, Atomic Siegert states in an electric field: Transverse momentum distribution of the ionized electrons, *Physical Review A* 82, 023416, 2010.
- [14]. W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, Numerical Recipes in FORTRAN (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).
- [15]. A.E.S. Green, D.L. Sellin, A.S. Zachor, Analytic independent-particle model for atoms, *Physical Review* 184, 1, 1969
- [16]. R.H. Garvey, C. H. Jackman, A.E.S. Green, Independent-particle-model potentials for atoms and ions with $36 < Z \leq 54$ and a modified Thomas-Fermi atomic energy formula, *Physical Review A* 12, 1144, 1975.
- [17]. R.G. Parr, Y. Weitao, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford University Press, Oxford, 1989.

The improved program calculating the photomomentum distribution induced by circularly polarized laser

Pham Nguyen Thanh Vinh

Department of Physics, HCM City University of Education
Corresponding author: vinhpnt@hcmue.edu.vn

Received: 04-09-2018, Accepted: 01-10-2018, Published: 15-10-2018.

Abstract—In this paper, we propose an improved method to curtail the time consumption of calculation within the adiabatic theory for the photomomentum distribution (PD) of hydrogen and argon atoms. The method is then extended for three-dimensional PD induced by circularly polarized laser. The study is an extension of the work [Phys. Rev. A 92, 043402 (2015)] and a direct comparison

of calculating efficiency based on that work is made. The hydrogen and argon atoms exposed to half-cycle laser pulses are used for illustration the applicability of the improved program. The results shows significant reduction in calculation time as well as good consistence between the current results and previous studies.

Index Terms—the time consumption of calculation, circularly polarized laser.