

کنترل امتداد و جهت‌مندی مولکولی به وسیله پالس لیزر دورنگی

رضا سلمانی^{1*}، علی نوید²

1. مربی، دانشکده علوم پایه، گروه فوتونیک، دانشگاه بناب، بناب

2. استادیار، دانشکده علوم پایه، گروه فوتونیک، دانشگاه بناب، بناب

تاریخ دریافت: 1395/10/10 تاریخ پذیرش: 1395/11/25

Control of molecular alignment and orientation by Two-color laser pulse

R. Salmani^{*1}, A. Navid²

1. Lecturer, Department of Science, Photonics Group, University of Bonab, Bonab

2. Assistant Professor, Department of Science, Photonics Group, University of Bonab, Bonab

Received: 2016/12/20 Accepted: 2017/02/13

Abstract

In this paper, we present an effective scheme to control molecular alignment and orientation by interaction of molecule with Two-color femtosecond laser pulse. For this purpose, we use numerical solution of the time - dependent Schrodinger equation for a linear molecule of carbon monoxide to achieve the control of Molecular Alignment and Orientation. Afterward, by using the Genetic algorithm, optimization on parameters of laser pulse take place. A suitable cost function was introduced in Genetic algorithm and showed that we can improve the intended control in this approach.

Keyword

Two-color Laser, Molecular Alignment, Genetic Algorithm.

چکیده

در این مقاله روش مؤثری را برای کنترل امتداد و جهت‌مندی مولکولی، به وسیله برهم کنش مولکول با پالس لیزر دورنگی فمتوثانیه، ارائه می‌دهیم. بدین منظور، با استفاده از حل عددی معادله شرودینگر وابسته به زمان برای مولکول خطی مونوکسید کربن به رابطه‌ای برای کنترل امتداد و جهت‌مندی مولکولی می‌رسیم. سپس با استفاده از الگوریتم ژنتیک، بر روی پارامترهای پالس لیزری بهینه‌سازی صورت می‌گیرد. تابع ارزش مناسبی در الگوریتم ژنتیک معرفی و نشان داده می‌شود که می‌توان از این طریق کنترل مورد نظر را بهبود بخشید.

واژگان کلیدی

لیزر دو رنگی، جهت‌مندی مولکولی، الگوریتم ژنتیک.

مقدمه

آرایش قرارگیری مولکول‌ها در حالت گازی دارای نظم خاصی نیست، اما با استفاده از شیوه‌هایی می‌توانیم بر روی آنها کنترلی ایجاد کنیم. دو مورد از مهم‌ترین این شیوه‌های کنترلی، استفاده از پدیده‌های امتدادگیری و جهت‌مندی مولکولی است [1].

از آن جایی که خاصیت مولکولی به شدت به چرخش در فضا بستگی دارد، کنترل چرخش مولکول با استفاده از پدیده‌های امتدادگیری و جهت‌مندی، نقش مهمی را در واکنش‌های دوطرفه و اندازه‌گیری کمیت‌های فیزیکی مولکول در چهارچوب مولکولی ایفا می‌کند [2]. این دو پدیده در دهه‌های اخیر با استفاده از روش‌هایی مانند: انفجار کولنی [3]، هماهنگ‌های مرتبه بالا [4]، ترکیب چهار موج [5]، تراهرتز کوتاه [6] و ترکیب میدان پالس‌های لیزر دورنگی [7] به دست آمده‌اند.

از نقطه نظر برنامه‌های کاربردی، به دلیل مزیت فراوان این پدیده‌ها در گرایش‌های متفاوت علم فیزیک، دستیابی به مقدار بالاتری از آنها برای مطالعه مولکول، مطلوب است. با این حال افزایش جهت‌مندی و امتدادگیری مولکولی به دلیل افزایش شدت لیزر و در نتیجه یونیزه شدن مولکول، دشوار است [2]. تلاش‌هایی برای بهبود و افزایش این کنترل‌ها به وسیله چند پالس [8] و تغییر شکل پالس [9] انجام شده است.

نظریه کنترل بهینه [10] به طور گسترده برای کنترل فرایندهای اتمی و مولکولی مورد استفاده قرار گرفته است [11].

با اندرکنش پالس‌های شکل‌یافته با یک سیستم اتمی یا مولکولی رویای کنترل محصولات خروجی به حقیقت پیوسته است. هدف ما در اینجا، اعمال کنترل و بهبود هرچه بیشتر آن، بر روی چرخش مولکول با استفاده از تغییر پارامترهای لیزر است.

در اینجا از مولکول خطی مونوکسید کربن به عنوان نمونه برای تأیید محاسبات استفاده می‌شود و بهینه‌سازی با استفاده از الگوریتم ژنتیک بر روی این مولکول انجام می‌گیرد.

مدل نظری

برای محاسبه جهت‌مندی و امتداد مولکولی باید معادله شرویدینگر را برای تابع موج حاصل از برهم کنش مولکول و میدان لیزری حل کنیم. بدین منظور میدان اپتیکی لیزر فمتوثانیه را به صورت

$$(1) \quad E(t) = E_0 \exp(-2 \ln 2 \frac{t^2}{\tau^2}) [\cos(\omega t) + g \cos(2\omega t + f)]$$

در نظر می‌گیریم که در آن ω فرکانس بسته‌های موج، E_0 دامنه میدان، τ پهنای پالس لیزر، γ قدرت میدان وابسته و ϕ فاز بسته‌های موج است که ساختار میدان اپتیکی پالس را مشخص می‌کند. در این مقاله همه مقادیر برحسب سیستم واحد اتمی بیان شده است. با توجه به این میدان اپتیکی، معادله شرویدینگر وابسته به زمان را می‌توان با استفاده از تقریب چرخنده صلب [12] به صورت

$$(2) \quad i\hbar \frac{\partial \psi(q, f, t)}{\partial t} = [H_0 + V_m(q)E(t) + V_{pol}(q)E(t)^2 + V_{hyp}(q)E(t)^2] \psi(q, f, t)$$

نمایش داد که در آن

$$(3) \quad \begin{aligned} H_0 &= B I (I + 1) \\ V_m(q) &= -m \cos(q) \\ V_{pol}(q) &= \frac{-[(a_{\parallel} - a_{\perp}) \cos^2(q) + a_{\perp}]}{2} \\ V_{hyp}(q) &= \frac{-[(b_{\parallel} - 3b_{\perp}) \cos^3(q) + 3 \cos(q) b_{\perp}]}{6} \end{aligned}$$

(6)

$$E(t) = E_0 \exp(-2 \ln 2 \frac{t^2}{\tau^2}) [\cos(at) + b \cos(2at + f)]$$

باشد که تابع دو پارامتر a (فرکانس) و b (قدرت میدان وابسته لیزر) است که از طریق فرایند بهینه‌سازی به دست خواهند آمد و این به آن معنی است که در اینجا دو پارامتر: 1. فرکانس و 2. قدرت میدان وابسته پالس لیزر را برای بهبود در جهت‌مندی و امتداد مولکولی در نظر گرفته‌ایم.

پس از محاسبه میدان اپتیکی بهینه، با استفاده از معادلات (1) تا (5) مقدار بهینه شده جهت‌مندی و امتداد مولکولی نیز محاسبه می‌شود.

محاسبات عددی و بحث

تابع موج $\Psi_{L,m}(t)$ را بر اساس روش جداسازی عملگری و با استفاده از تبدیل نمایش برپایه تقسیمات نامساوی [15]، محاسبه می‌کنیم. سپس با استفاده از معادلات (4) و (5) و داده‌های جدول 1 که به عنوان مرجعی [16] مناسب برای مقایسه در نظر گرفته شده است، جهت‌مندی و امتداد را برای مولکول مونوکسید کربن به دست می‌آوریم و سپس به بهینه‌سازی می‌پردازیم.

با توجه به مقادیر جدول 1 محاسبات را برای جهت‌مندی و امتداد مولکولی انجام داده‌ایم که نتایج آن در شکل‌های 1 و 2 و همچنین جدول 2 آورده شده است. چنانچه در شکل 1 «الف» دیده می‌شود، مولکول در حالت آزاد خود با توجه به دوره تناوب عادی خودش با احتمالی مساوی در حال چرخش است، ولی در حالت «ب» که پالس لیزر بر روی مولکول اثر می‌کند، احتمال توزیع زاویه‌ای مولکول در راستای خاصی شدت می‌گیرد. همچنین در شکل 2 الف باز هم مولکول در حالت آزاد خودش است و به طور طبیعی جهت‌گیری خاصی ندارد؛ بنابراین نمودار مقدار صفر را در تمام مدت چرخش مولکول نشان می‌دهد. ولی در شکل 2 ب دیده می‌شود اثر لیزر موجب جهت‌گیری مولکول در راستاهای خاصی

است. در اینجا B ثابت چرخش، 1 عدد کوانتومی زاویه‌ای، μ دو قطبی دائمی، θ زاویه بین محور مولکول و راستای قطبش میدان لیزر، α_{\parallel} و α_{\perp} به ترتیب ضریب قطبیدگی موازی و عمودی محور مولکولی، β_{\parallel} و β_{\perp} به ترتیب ضریب قطبیدگی مرتبه بالای موازی و عمودی محور مولکول هستند.

بعد از حل معادله شرودینگر وابسته به زمان و به دست آمدن تابع موج حالت برهم‌کنشی لیزر و مولکول $\Psi_{L,m}(t)$ ، جهت‌مندی مولکولی با استفاده از تابع توزیع دمایی بولتزمن [13] به صورت

(4)

$$\langle \cos(q) \rangle_t = \frac{\sum_L \exp(-BL(L+1)/KT)}{\sum_L (2L+1) \exp(-BL(L+1)/KT)} \sum_{m=-L}^L y_{L,m}(t) |\cos(q)| y_{L,m}(t)$$

و امتدادگیری نیز به صورت

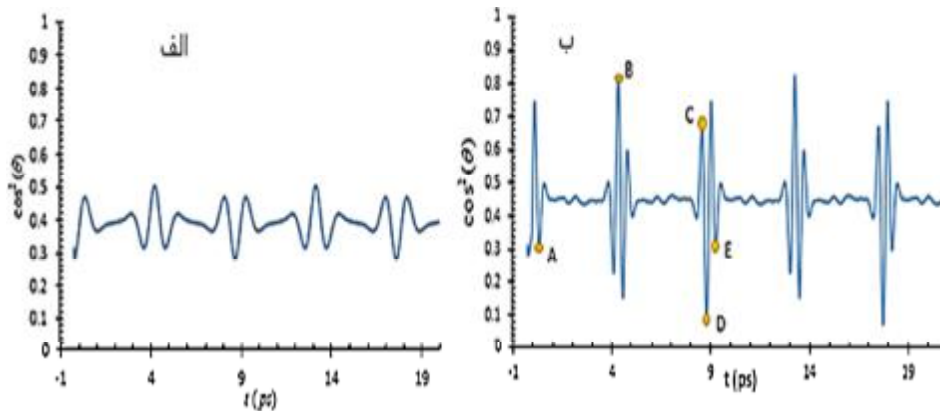
(5)

$$\langle \cos^2(q) \rangle_t = \frac{\sum_L \exp(-BL(L+1)/KT)}{\sum_L (2L+1) \exp(-BL(L+1)/KT)} \sum_{m=-L}^L y_{L,m}(t) |\cos^2(q)| y_{L,m}(t)$$

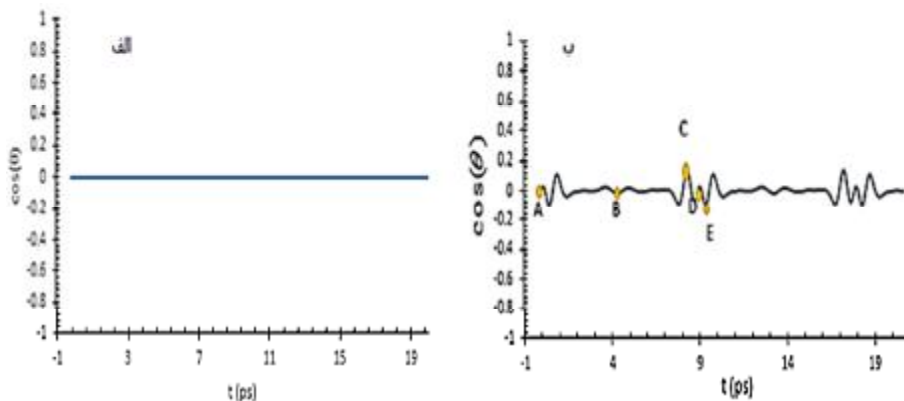
محاسبه می‌شوند.

استفاده از الگوریتم ژنتیک برای بهینه‌سازی

برای بهینه‌سازی از الگوریتم ژنتیک استفاده می‌کنیم [14]. الگوریتم ژنتیک یک روش جستجوی اتفاقی است که بر اساس پدیده انتخاب طبیعت و اصول ژنتیک بنا شده است. این الگوریتم نیازمند معرفی تابع ارزش مناسبی برای بهینه‌سازی است. در اینجا با بهینه کردن پالس لیزر، جهت‌مندی و امتداد مولکولی را بهینه خواهیم کرد. بدین منظور فرض می‌کنیم میدان اپتیکی معادله (1) به صورت



شکل 1. نمودار امتدادگیری برای مولکول مونوکسید کربن را الف) در غیاب پالس لیزر ب) در حضور پالس لیزر نشان می‌دهد.



شکل 2. نمودار جهت‌مندی برای مولکول مونوکسید کربن را الف) در غیاب پالس لیزر ب) در حضور پالس لیزر نشان می‌دهد.

امتدادگیری و $E = -0/106$ برای حداکثر پاد جهت‌مندی هستند. پس از محاسبه جهت‌مندی و امتدادگیری به بهینه‌سازی آنها می‌پردازیم تا بدین طریق کنترل بر روی مولکول را افزایش دهیم. برای این کار از نظر ریاضی تابع ارزش مناسب در بهینه‌سازی را به صورت

$$J(a, b) = E_0 \exp\left(-2 \ln 2 \frac{t^2}{t_0^2}\right) [\cos(at) + b \cos(2at + f)] \quad (7)$$

شده است. با توجه به آنچه گفته شد به وجود آمدن تغییرات در حرکت عادی مولکول، که به وسیله پالس لیزر و با نظم خاصی صورت می‌گیرد به معنی اعمال کنترل در نحوه جهت‌گیری و چرخش مولکول و هدف اصلی ما در این مقاله است.

مقادیری که با انجام محاسبات برای نقاط مشخص شده در شکل‌های 1 و 2 به دست آمده‌اند به صورت $B = 0/824$ برای حداکثر امتدادگیری، $C = 0/137$ برای حداکثر جهت‌مندی، $D = 0/081$ برای حداکثر پاد

جدول 1. پارامترهای پالس لیزر

پارامترها	مقادیر
ثابت چرخش مولکولی	$B = 8/793 \times 10^{-6}$
ممان دو قطبی	$\mu = 0/044$
ضریب قطبیدگی موازی محور مولکولی	$\alpha_{ } = 15/38$
ضریب قطبیدگی عمود محور مولکولی	$\alpha_{\perp} = 11/84$
ضریب قطبیدگی مرتبه بالای موازی محور مولکولی	$\beta_{ } = 29/4018$
ضریب قطبیدگی مرتبه بالای عمود محور مولکولی	$\beta_{\perp} = 5/6868$
دامنه میدان لیزر	$E_0 = 0/053$
دوره چرخش مولکول	$T_{rot} = 8/27 \times 10^5$
فرکانس لیزر	$\omega = 0/056$
پهنای زمانی پالس لیزر	$\tau = 1860/35$
قدرت میدان وابسته	$\gamma = 1$
فاز	$\phi = 0$

آمده است. با توجه به مقادیر جدول‌های 1 و 2 به محاسبه جهت‌مندی و امتدادگیری در حالت بهینه پرداخته‌ایم که نتایج آن برای نقاط با اهمیت شکل‌های 1 و 2 به صورت $B = 0/840$ برای حداکثر امتدادگیری، $C = 0/159$ برای حداکثر جهت‌مندی، $D = 0/074$ برای حداکثر پاد امتدادگیری و $E = -0/123$ برای حداکثر پاد جهت‌مندی به دست آمده‌اند. برای درک بهتر بهبودهای حاصل از بهینه‌سازی، مقادیر به دست آمده در دو حالت قبل و بعد از بهینه‌سازی را برای نقاط مهم نمودار جهت‌مندی و امتدادگیری در جدول 3 آورده‌ایم.

معرفی می‌کنیم و برای جلوگیری از یونیزه شدن بیش از حد مولکول به وسیله لیزر و دیگر مشکلات برهم‌کنشی، محدوده‌های دو پارامتر a و b را به صورت

$$\begin{cases} 1 \leq b \leq 1.5 \\ 0.01 \leq a \leq 0.1 \end{cases} \quad (8)$$

در نظر می‌گیریم.

با توجه به مقادیر جدول 1 و محدودیت‌های (8)، تابع ارزش J در معادله (7) به وسیله الگوریتم ژنتیک بهینه می‌شود که نتایج آن در جدول 2 برای دو پارامتر a و b

جدول 2. مقادیر بهینه به دست آمده از الگوریتم ژنتیک

مقدار	$a = \omega$ فرکانس	$b = \gamma$ قدرت میدان وابسته
موجود در جدول 1	0/056	1
بهینه شده برای جهت‌مندی	0/072632	1/006250
بهینه شده برای امتدادگیری	0/047231	1/195618

جدول 3. مقادیر قبل و بعد از بهینه‌سازی برای نقاط مهم در نمودارهای جهت‌مندی و امتدادگیری مولکولی

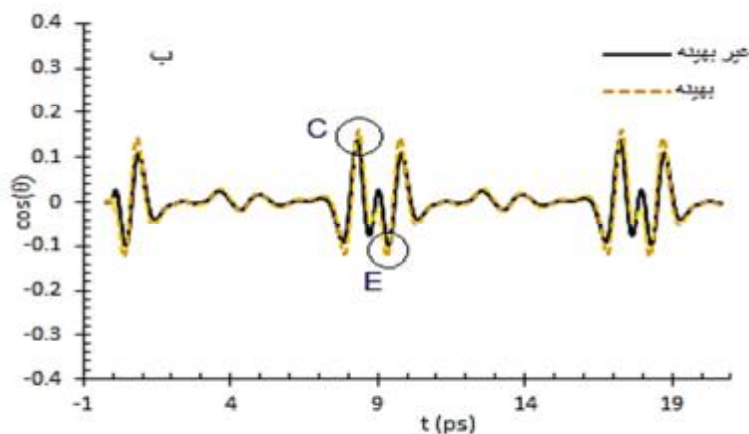
	B	C	D	E
قبل از بهینه‌سازی	0/824	0/137	0/081	-0/106
بعد از بهینه‌سازی	0/840	0/159	0/074	-0/123
اختلاف بهینه‌سازی‌ها (Δ)	0/016	0/022	0/007	0/017

شاهد هستیم که این خود تأییدی بر درستی محاسبات و کار انجام شده ما در این مقاله است.

نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از حل عددی معادله شرودینگر، اعمال تغییر در پارامترهای میدان اپتیکی لیزر و استفاده از الگوریتم ژنتیک به عنوان روشی برای بهینه‌سازی، به محاسبات دقیق و درستی برای ارزش انتظاری‌ها دست

با توجه به جدول 3 مشاهده می‌شود که مقادیر مورد نظر با بهبودهای خوبی همراه بوده است. این بهبودها گرچه از مرتبه 0/01 است ولی با توجه به مشکل بودن ایجاد کنترل بر روی مولکول [17]، بهبودهای جالب توجه و خوبی محسوب می‌شوند. برای درک بهتر نتایج حاصل، نمودارهای مقایسه‌ای از جهت‌مندی و امتدادگیری را در شکل‌های 3 و 4 آورده‌ایم. در شکل‌های 3 و 4 به وضوح کار بهینه‌سازی انجام

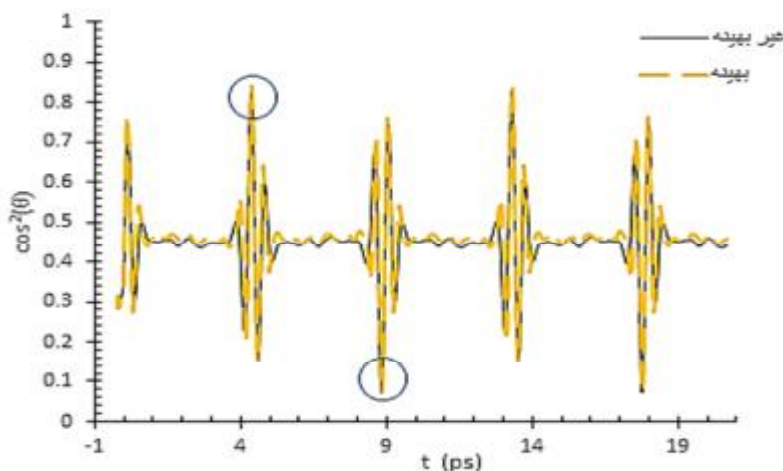


شکل 3. نمودارهای جهت‌مندی بهینه و غیر بهینه به صورت مقایسه‌ای

یافتیم.

با استفاده از این محاسبات توانستیم جهت‌مندی و امتدادگیری مولکولی را تا حدی افزایش دهیم که این خود باعث بهبود نتایج در کاربردهای این پدیده‌ها در علم

شده و بهبودهای حاصل از آن نشان داده شده است. چنان که دیده می‌شود، علاوه بر اینکه مقادیر برای نقاط مورد نظر افزایش خوبی داشته است، در سایر نقاط هم انطباق خوبی را برای دو نمودار بهینه و غیر بهینه



شکل 4. نمودارهای امتدادگیری بهینه و غیر بهینه به صورت مقایسه‌ای

مطابقت نتایج به دست آمده با مقادیر مرجع مورد استفاده، تأییدی بر درستی محاسبات ما است. در نهایت با توجه به آنچه تاکنون گفته شد، نتیجه می‌گیریم که می‌توان با ایجاد تغییراتی در پارامترهای لیزر برهم کنشی و البته با رعایت محدودیت‌های لازم، به مقادیر بالاتری در کنترل مولکولی مورد نظر دست پیدا کرد.

شیمی فیزیک و در روند کنترل شیمیایی مولکول می‌شود.

با به کار بردن میدان اپتیکی بهینه‌ای که از الگوریتم ژنتیک به دست آوردیم به محاسبه جهت‌مندی و امتدادگیری برای مولکول مونوکسید کربن پرداختیم، که نتایج محاسباتمان نشان دادند که این بهینه‌سازی تأثیرات مثبتی بر کنترل مولکول ایجاد کرده است.

منابع

- [1] Sharly Fleischer, Yan Zhou, Robert W. Field, and Keith A. Nelson, *Physical Review Letters* 107, 163603 (2011).
- [2] Christer Z. Bisgaard, Owen J. Clarkin, Guorong Wu, Anthony M. D. Lee, Oliver Gefner, Carl C. Hayden, and Albert Stolow, *Science* 323 (2009).
- [3] P. W. Dooley, I. V. Litvinyuk, Kevin F. Lee, D. M. Rayner, M. Spanner, D. M. Villeneuve, and P. B. Corkum, *Physical Review A* 68, 023406 (2003).
- [4] Tsuneto Kanai, Shinichirou Minemoto, and Hirofumi Sakai, *Physical Review Letters* 98, 053002 (2007).
- [5] Xiaoming Ren, Varun Makhija, and Vinod Kumarappan, *Physical Review A* 85, 033405 (2012).
- [6] K. N. Egodapitiya, Sha Li, and R. R. Jones, *Physical Review Letters* 112, 103002 (2014).
- [7] P. M. Kraus, D. Baykusheva, and H. J. Wörner, *Physical Review Letters* 113, 023001 (2014).
- [8] S. Zhdanovich, A. A. Milner, C. Bloomquist, J. Floß, I. Sh. Averbukh, J. W. Hepburn, and V. Milner, *Physical Review Letters* 107, 243004 (2011).

- [9] Kazuyuki Nakagami, Yoshihiko Mizumoto, and Yuki Yoshi Ohtsuki, *The Journal of Chemical Physics* 129, 194103 (2008).
- [10] S Sharma and H Singh, *Chemical Physics* (2011).
- [11] Constantin Brif, Raj Chakrabarti, and Herschel Rabitz, *New Journal of Physics* 12, 075008 (2010).
- [12] Dr. Malte Oppermann, *Springer Theses* 53, 235 (2011).
- [13] Barry I. Schneider, Johannes Feist, Stefan Nagele, Renate Pazourek, Suxing Hu, Lee A. Collins, Joachim Burgdörfer, André D. Bandrauk, and Misha Ivanov, *Media*, 149 (2011).
- [14] David E. Goldberg, *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*-Addison-Wesley Professional (1989) (1989), p. 432.
- [15] I.V Krylov and Arthur H. Stroud, (2005).
- [16] Chao-Chao Qin, Xing-Dong Zhao, Xian-Zhou Zhang, and Yu-Fang Liu, *Chinese Physics Letters* 30, 023302 (2013).
- [17] Henrik Stapelfeldt and Tamar Seideman, *Reviews of Modern Physics* 75, 543 (2003).