

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОНТРОЛЬ ФОТОФРАГМЕНТАЦИИ ИОНОВ В ПОЛЕ ДВУХ УЛЬТРАКОРОТКИХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ

М. В. Корольков

Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск

E-mail: korolkovm@Yahoo.com

На основе квантового описания процесса фотофрагментации ионов численно исследованы возможности управления продуктами распада и эффективностью фотофрагментации в случае воздействия на ион двух сдвинутых по времени, ультракоротких лазерных импульсов фемтосекундной длительности (УКИ). Метод оптимизации процесса фотофрагментации основан на том, что формирующееся интерференционное поле и форма его огибающей зависят от задержки между импульсами и несущей фазы каждого из них. Совместное влияние задержки между импульсами и, прежде всего, значения несущей фазы второго импульса, проявляется в формировании диссоциации из переходного состояния колебательного волнового пакета, сформированного первым импульсом. К началу второго импульса этот волновой пакет, движущийся в определенной пространственной зоне и локализованный в окрестности энергий нескольких колебательных состояний, определяет новые начальные условия в момент начала действия второго импульса. Это приводит к существенной зависимости молекулярной динамики от времени задержки второго импульса и его несущей фазы и существенно усложняет колебательную динамику волновых пакетов в каждом из электронных состояний, индуцируя переходы между ними в широком диапазоне координат от почти равновесного состояния ядер до состояния практически полной диссоциации [1, 2]. Нами продемонстрировано, что применение двух сдвинутых по времени когерентных лазерных импульсов является мощным инструментом, обеспечивающим дополнительные возможности управления процессами возбуждения и фотодиссоциации, приводящим к перемешиванию процессов электронной и ядерной динамики [1, 2].

Моделирование процессов фотофрагментации в поле двух сдвинутых во времени импульсов мы рассматриваем на примере иона DCl^+ , используя подход развитый нами ранее для описания фотофрагментации иона в поле одного УКИ [3, 4]. Анализ динамики фотофрагментации DCl^+ проводится на основе численного решения системы уравнений Шредингера, учитывающих три канала диссоциации [3].

В качестве примера рассмотрена фотодиссоциация иона DCl^+ , протекающая в интерференционном поле двух идентичных лазерных импульсов различной длительности (от 100 до 10 фс), как функция временной

задержки между этими импульсами. В зависимости от величины задержки между импульсами Δt можно выделить три характерные области динамики фотофрагментации. Первая область соответствует почти полному перекрытию лазерных импульсов. В ней формирование продуктов распада периодически изменяется в соответствии с осцилляцией величины эффективной интенсивности интерференционного поля $W(\Delta t) = \int |E(t) + E(t+\Delta t)|^2 dt$. Когда время задержки достигает величины сравнимой с длительностью импульса ситуация меняется. Могут возникать качественные изменения зависимости результатов фотофрагментации от времени задержки. Локальные максимумы продуктов фотофрагментации, соответствующие локальным максимумам функции $W(\Delta t)$, могут переходить в локальные минимумы. В этих условиях электронная и ядерная динамики становятся взаимно зависимыми и их существенное влияние друг на друга приводит к большой чувствительности результатов фотофрагментации от параметров УКИ и задержки Δt между импульсами.

При дальнейшем увеличении задержки Δt возникает периодическая зависимости эффективности фотофрагментации с периодом характерным для колебательного движения иона. Причиной этого являются квазипериодические начальные условия, обусловленные движением волнового пакета внутри основного электронного состояния после окончания первого УКИ и до начала действия второго.

Формирование ионов Cl^+ и D^+ в противофазе – это ещё одна особенность молекулярной динамики, наблюдающаяся при больших задержках Δt . Причиной формирования конкурирующих продуктов фрагментации в противофазе является пространственная локализация электрона в ионе в момент фотофрагментации.

Таким образом, использование интерференционного поля двух одинаковых, но сдвинутых по времени когерентных импульсов, позволяет эффективно управлять процессом фотоиндуцированной диссоциации и реализовывать необходимую фотофрагментацию.

1. Korolkov M. V., Weitzel K. - M. // *Chemical Physics Letters*. 2010. Vol. 487. P. 209–213.
2. Korolkov M. V., Weitzel K. - M. // *Zeitschrift fuer Physikalische Chemie*. 2011. Vol. 225. P. 1073–1088.
3. Korolkov M. V., Weitzel K. - M. // *Journal of Chem. Phys.* 2005. Vol. 123. P. 164308.
4. Korolkov M. V., Weitzel K. - M. // *Chemical Physics*. 2007. Vol. 338. P. 277–284.