

Research Paper

Investigating Effective Parameters in the High-Harmonic Spectra from WSe₂ Structure¹

Razieh Faghihlatif², Amin Sadeghifaraz³,
Mohammad Monfared⁴ and Elnaz Irani^{*5}

Received: 2022.12.17

Revised: 2023.03.03

Accepted: 2023.04.04

Abstract

In this research, the symmetry of high-order harmonics resulting from the interaction of a single-layer WSe₂ with a linearly polarized laser in both zigzag and armchair directions have been investigated using time-dependent density functional theory in real space. The dependence of the cutoff frequency behavior with the increase of the electric field amplitude and the behavior of the harmonic yield with the laser wavelength has been analyzed. The results show the linear dependence of the cutoff frequency with the electric field and the exponential behavior of the harmonic yield with the laser wavelength. Also, the effect of the input laser field polarization on the high-order harmonic spectrum and harmonic yield has been investigated. Changing the rotation angle of laser polarization to 30 degrees for elliptically polarized light with an ellipticity parameter of 0.1 creates the highest harmonic yield. Also, the results of this research show that by changing the polarization of the input electric field, the polarization of high-order harmonics also changes, which leads to the production of high-order harmonics with different polarization.

Keywords: *High-Order Harmonics, WSe₂ Semiconductor, Harmonic Yield, Elliptical Polarization, Time-Dependent Density Functional Theory.*

¹ DOI: 10.22051/ijap.2023.42315.1306

² M. Sc. Student, Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran. Email: marzie.latif@gmail.com

³ PhD Student, Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran. Email: aminsadeghifaraz@yahoo.com

⁴ Researcher, Institute of Condensed Matter Theory and Optics, Friedrich-Schiller-University Jena, Max-Wien-Platz 1, Jena D-07743, Germany. Email: m.monfared@yahoo.com

⁵ Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Basic Sciences, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran (Corresponding Author). Email: e.irani@modares.ac.ir

بررسی پارامترهای موثر در طیف هماهنگ مراتب بالا از ساختار دی سلنید تنگستن^۱

راضیه فقیه لطیف^۲، امین صادقی فراز^۳، محمد منفرد^۴ و الناز ایرانی^{۵*}

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۹/۲۶

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۱/۱۲/۱۲

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۱/۱۵

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال سیزدهم، پیاپی ۳۴، پاییز ۱۴۰۲

صص ۲۵ - ۴۷

چکیده:

در این پژوهش تقارن هماهنگ‌های مرتبه بالای منتج از برهمکنش تک لایه دی سلنید تنگستن با نور قطبیده خطی در دو راستای زیگزاگ و آرمیچر با نظریه تابعی چگالی وابسته زمانی در فضای حقیقی بررسی شده است. وابستگی رفتار فرکانس قطع با افزایش دامنه میدان الکتریکی و رفتار بازده هماهنگ با طول موج بررسی و تحلیل شده است. نتایج بدست آمده وابستگی خطی فرکانس قطع با میدان الکتریکی و رفتار نمایی بازده هماهنگ به طول موج لیزر را نشان می‌دهد. همچنین اثر قطبش میدان لیزر ورودی بر طیف هماهنگ‌های مرتبه بالا و بازده آن‌ها بررسی شده است. در واقع با استفاده از تب لیزر قطبیده بیضوی با پارامتر الیپتیسیته ۰/۱ به نحوی که قطر اصلی آن در راستای آرمیچر باشد بیشترین بازدهی حاصل می‌شود. افزون بر این، نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که با تغییر قطبش میدان الکتریکی ورودی قطبش هماهنگ‌های مرتبه بالا نیز تغییر می‌کند که منجر به تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا با قطبش‌های مختلف می‌شود.

واژگان کلیدی: هماهنگ مراتب بالا، نیمه‌هادی دی سلناید تنگستن، بازده هماهنگ، قطبش بیضوی، نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان.

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2023.42315.1306

^۲ دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک اتمی مولکولی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران. Email: marzie.latif@gmail.com

^۳ دانشجوی دکترا، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک اتمی مولکولی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران. Email: aminsadeghifaraz@yahoo.com

^۴ پژوهشگر، انستیتو نظریه ماده چگال و ایتیک، دانشگاه فردرج-شیلر ینا، ینا، آلمان. Email: m.monfared@yahoo.com

^۵ استادیار، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک اتمی مولکولی، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران (نویسنده مسئول). Email: e.irani@modares.ac.ir



۱. مقدمه

تولید هماهنگ مراتب بالا (HHG) یک فرآیند اپتیکی غیرخطی است که از برهمکنش یک سامانه اتمی، مولکولی، یا یک بلور جامد با یک میدان لیزری قوی ایجاد می‌شود به صورتی که ده‌ها یا صدها فوتون کم انرژی به یک فوتون پر انرژی تبدیل می‌شود [۱]. دستیابی به تپ‌های آتوثنایه از راه فرآیند هماهنگ مرتبه بالا امکان بررسی پدیده‌هایی چون مطالعه دینامیک الکترون، توموگرافی اوربیتال‌های مولکولی، طیف‌سنجی مولکولی و تصویربرداری سامانه‌های کوانتومی که در بازه‌های زمانی فروکوتاه روی می‌دهند را فراهم کرده است. تولید هماهنگ مراتب بالا از گازها معمولاً برای تولید منابع لیزر آتوثنایه در محدوده طول موج از پرتو مرئی تا پرتو ایکس نرم استفاده می‌شود [۲-۴]. با این حال، همچنان بازه پایین تپ‌های خروجی چالش مهمی است که در حوزه علم شناسایی فرآیندهای فروکوتاه وجود دارد [۱، ۵، ۶]. با توجه به اینکه جامدات دارای چگالی الکترونیکی بالاتری در مقایسه با گازها هستند، می‌توانند گزینه بهتری برای تولید منابع HHG کارآمدتر باشند [۷]. تولید هماهنگ مراتب بالا در سال ۱۹۶۶ توسط فرانکلین و همکاران آغاز شد. آنها در این سال موفق به تولید هماهنگ مرتبه دوم با استفاده از بلور کبالت شدند [۸]. یک سال بعد، در سال ۱۹۶۷، این گروه موفق به تولید هماهنگ مرتبه سوم از گازهای نجیب شد. پس از آن، مک فارسون هماهنگ‌های مرتبه بالا را تا مرتبه هفدهم از گاز نئون بدست آورد [۹]. در سال ۱۹۹۳، الگوی بیانی فیزیکی فرآیند تولید هماهنگ‌های مراتب بالا در سامانه‌های اتمی توسط کرکوم ارائه شد و ساده‌ترین رهیافتی بود که فیزیک فرآیند تولید هماهنگ مراتب بالا را بیان می‌کرد [۱۰]. این الگو شامل سه مرحله یونش، شتاب‌دهی و بازترکیب بود که ابتدا اتم یا گاز نجیب با میدان لیزر برهمکنش می‌کند، الکترون به روش تونل‌زنی از قید هسته خارج شده و سپس در میدان لیزر شتاب می‌گیرد که با تغییر علامت میدان لیزر، الکترون در جهت مخالف به سمت یون مادر شتاب می‌گیرد. این الکترون می‌تواند با یون مادر باز ترکیب شده و انرژی جنبشی خود را به علاوه انرژی یونش در قالب یک فوتون گسیل کند. مطالعات بر روی انواع اتم‌ها و مولکول‌ها ادامه یافت تا اینکه در سال ۲۰۰۵ تولید هماهنگ مراتب بالا از سامانه‌های جامد توسط فیس و وگنر با استفاده از ساختارهایی چون SiO_2 و گرافن بررسی شد [۱۱]. در همین سال نیز کخ و کایرا رهیافت نظری معادلات کوانتوم اپتیکی بلاخ را برای توجیه تولید هماهنگ مراتب بالا در نیمه‌هادی‌ها ارائه کردند [۱۲، ۱۳]. مطالعات براساس رهیافت معادلات بلاخ تا سال ۲۰۱۱ ادامه یافت که در آن سال قیمایر، تولید هماهنگ‌های مرتبه بالا از بلور اکسید روی را با استفاده از رهیافت معادلات بلاخ بررسی نمود و آن را با طیف‌های تجربی بدست آمده مقایسه کرد [۱۴]. در حقیقت، در رهیافت بلاخ و مدل کرکوم، سامانه‌ها به



صورت تک الکترونی فرض می‌شوند اما در سامانه‌های اتمی، مولکولی و مواد چگال‌تر همچون نیمه‌هادی، که چگالی بار زیادی دارند، اثرات چند-الکترونی و پتانسیل‌های همبستگی و تبادل الکترون‌ها اهمیت بالایی پیدا می‌کنند. از این رو، رهیافت نظریه تابعی چگالی با در نظر گرفتن این اثرات گسترش یافت [۱۵]. رویو و همکارانش در سال ۲۰۱۷، تولید هماهنگ مراتب بالا در اکسید منیزیم را از راه رهیافت نظریه تابعی چگالی وابسته زمانی مطالعه کردند [۱۶] و پس از چند سال، در سال ۲۰۲۰، نوریخس و همکارانش تپ آتو ثانیه از این ماده را بدست آوردند [۱۷]. به تازگی، بر روی مواد دو بعدی مطالعات گسترده‌ای صورت گرفته است. در سال ۲۰۱۹، پذیرفتاری غیرخطی در ساختار سولفید مولیبدن مورد بررسی قرار گرفت [۱۸]. همچنین در این سال، رویو و همکاران به بررسی اثر طیف هماهنگ‌های مرتبه بالا در ساختار نیتريد برم پرداختند [۱۹]. یوشیکاوا و همکاران در سال ۲۰۱۹، مطالعه تجربی طیف هماهنگ مراتب بالا را در ساختارهای دی‌کالکوژنید فلزات واسطه (TMD)، که در ادامه معرفی شده است، مورد بررسی قرار داده و با یکدیگر مقایسه نمودند [۲۰]. وابستگی HHG به طول موج و شدت میدان لیزر، دو موضوع مبهم در این زمینه هستند که برای درک بهتر نیازمند پژوهش‌های بیشتری است. برخی از مطالعات نشان می‌دهد که انرژی قطع در مقیاس‌های HHG حالت جامد به صورت $\sqrt{I}\lambda$ است [۱۸, ۲۱, ۲۲]. در حالی که، برخی دیگر آن را جدا از طول موج دریافتند [۷, ۲۳]. وابستگی بازده هماهنگ به طول موج در جامدات در مطالعات نظری با دیدگاه‌های متفاوتی از جمله بلوخ نیمه‌هادی (SBE) انجام شده است و نتایج ناسازگاری گزارش شده است [۱۲, ۲۴]. مدل SBE به کار گرفته شده در منبع [۲۵] یک مقیاس بندی λ^{-10} را برای زمان وافازی ۱ فمتوثانیه، و λ^{-4} را برای زمان وافازی بی‌نهایت پیش‌بینی می‌کند. از سوی دیگر، ومپا^۱ و همکارانش کاهش نمایی بازده هماهنگ را به ازای افزایش طول موج لیزر با استفاده از رویکرد SBE گزارش کردند [۲۶]. تنها مطالعه تجربی گزارش شده برای وابستگی بازده هماهنگ مرتبه بالا به طول موج، مقیاس بندی $\lambda^{-11/4 \pm 2/9}$ را نشان می‌دهد [۲۷]. همچنین، وابستگی HHG به سایر پارامترهای لیزر، چون زاویه قطبش خطی لیزر یا بیضوی بودن قطبش لیزر در آزمایش‌های گوناگونی مورد بررسی قرار گرفته است [۲۸-۳۰]، و بیشتر الگوهای مبتنی بر SBE برای بیان آن‌ها استفاده شده است. در رویکردهای SBE تعداد نوارهای کمی (بیشتر دو نوار و یک الکترون تک فعال) در نظر گرفته می‌شوند و اثرات چند الکترونی در نظر گرفته نمی‌شوند. برای توضیح بیشتر اثرات چند الکترونی در فرآیند HHG از روش کامل‌تری چون نظریه تابعی چگالی

^۱ Vampa

وابسته به زمان (TDDFT) استفاده می‌شود، که اگر چه پیچیدگی محاسبات در این روش بیشتر اما دقت محاسبات بالاتر است. از این رو، تعداد مطالعات کمتری برای بررسی وابستگی بهره هماهنگ به پارامترهای لیزر با استفاده از TDDFT در سامانه‌های حالت جامد و مواد چگال نسبت به سامانه-های اتمی و مولکولی انجام شده است [۷، ۱۶، ۳۱]. یکی دیگر از پارامترهای موثر در تحلیل طیف هماهنگ مراتب بالا، محاسبه قطبش هماهنگ مراتب بالای تولید شده است که امکان پیش‌بینی درست راستای انتشار و آشکار سازی هماهنگ تولیدی را فراهم می‌آورد که در سامانه نیمه‌هادی با وجود اهمیت کاربرد آن کمتر مورد بررسی قرار گرفته است [۳۱].

تمرکز این پژوهش روی بررسی وابستگی HHG به پارامترهای مختلف میدان لیزری از جمله طول موج مرکزی، شدت قله لیزر، زاویه قطبیدگی و میزان بیضوی بودن قطبش نور لیزر از تک لایه دی سلناید تنگستن (WSe_2) می‌باشد. محاسبات مربوط به بررسی اثر نوارهای کامل الکترونیکی ظرفیت و ملاحظه برهم کنش‌های چند الکترونی در فرآیند HHG بر پایه رویکرد TDDFT تحلیل می‌شود. تک لایه WSe_2 از خانواده مواد دی‌کالکوژنید فلزات واسطه (TMD) است که ویژگی‌های مکانیکی منحصر به فردی دارد. پایداری آن‌ها در برابر تغییر شکل‌های بزرگ قبل از گسیختگی به ما اجازه می‌دهد تا ساختار بلوری آن‌ها را دست کاری کنیم و ویژگی‌های نوری الکترونیکی آن‌ها را هدایت کنیم [۳۲-۳۶]. افزون بر این، تک لایه مواد TMD دارای یک شکاف باند مستقیم است که آن‌ها را برای کاربردهای فوتونیک و نوری مناسب می‌کند [۳۶]. بنابراین، این مواد اهداف بسیار جالب و بهینه برای تجزیه و تحلیل HHG در جامدات هستند [۱۴]. دلیل اصلی انتخاب ماده WSe_2 این است که با وجود کاربردهای گسترده بیان شده، مطالعات بسیار کمی بر روی این ماده صورت گرفته است. افزون بر این، بیشتر موادی که تاکنون مورد بررسی قرار گرفته‌اند دارای شکاف نوری بالاتری نسبت به تک لایه WSe_2 بوده‌اند.

در این پژوهش ابتدا طیف هماهنگ مراتب بالا به ازای دو راستای زیگزاگ و آرمیچر محاسبه شده است. سپس هماهنگ قطع به ازای افزایش قدرت میدان لیزری بررسی شده است. در ادامه طیف هماهنگ مراتب بالا به ازای تغییر پارامتر الپتیسیتهی تپ لیزر محاسبه و بازده هماهنگ مراتب بالا مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. همچنین، بازده هماهنگ مراتب بالا به ازای تغییر طول موج تپ لیزر ورودی محاسبه شده است. قطبش هماهنگ مراتب بالا نیز به ازای تغییر قطبش تپ لیزر ورودی محاسبه و اثرات چرخش تپ لیزر قطبیده بیضوی بر قطبش هماهنگ‌های خروجی بررسی شد. فیزیک حاکم بر قوانین مقیاس‌بندی با جزئیات، در بخش نتایج توضیح داده شده است.



۲. روش محاسبات

نظریه تابعی چگالی روشی برای حل معادله شرودینگر برای سامانه‌های بس ذره‌ای است. باکمک این رهیافت معادله شرودینگر برای سامانه‌های بس ذره‌ای تبدیل به یک معادله شبه شرودینگر و به صورت معادله تک ذره‌ای شرودینگر، معروف به معادله کوهن-شم، که اساس نظریه تابعی چگالی است، می‌شود. روش کار در این رهیافت به گونه‌ای است که سامانه با یک سامانه کمکی بدون برهمکنش جایگزین شده و اثرات برهمکنشی بین الکترون‌ها با اضافه کردن پتانسیل برهمکنش تبدیلی-همبستگی به هامیلتونین جبران می‌شود. معادله کوهن-شم به صورت زیر است:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_i(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\nabla^2}{2} + V_{KS}(\mathbf{r}, t) \right] \psi_i(\mathbf{r}, t) \quad (1)$$

در رابطه بالا، V_{KS} پتانسیل کوهن-شم وابسته به زمان است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$V_{KS}[n](\mathbf{r}, t) = V_{ext}(\mathbf{r}, t) + V_H(\mathbf{r}, t) + V_{xc}(\mathbf{r}, t) + V_{ne}(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

که این پتانسیل شامل پتانسیل‌های خارجی $V_{ext}(\mathbf{r}, t)$ ، پتانسیل هارتری $V_H(\mathbf{r}, t)$ ، پتانسیل تبدیلی-همبستگی $V_{xc}(\mathbf{r}, t)$ و شبه پتانسیل الکترون-هسته $V_{ne}(\mathbf{r}, t)$ است. برای پتانسیل تبدیلی-همبستگی از تقریب LDA استفاده می‌شود. برای $V_{ne}(\mathbf{r}, t)$ ، شبه پتانسیل هارتویگسن-گودکر-هاتر (HGH) در تقریب چگالی موضعی برای تولید پتانسیل موثر برای الکترون‌های ظرفیت در تک لایه WSe₂ استفاده می‌شود [۳۷]. بر اساس این تقریب، فرض می‌شود که تنها شش الکترون ظرفیت از هر اتم (تنگستن یا سلنیوم) در برهمکنش لیزر-جامد نقش دارند و الکترون‌های هسته در طول محاسبه ساکن می‌شوند. بنابراین، شبه پتانسیل $(V_{ne}(\mathbf{r}, t))$ بین هسته و الکترون‌های ظرفیت با در نظر گرفتن اثر محافظ الکترون‌های هسته است. پتانسیل هارتری، که نشان دهنده پتانسیل الکترواستاتیکی از چگالی بار الکترون است، با رابطه زیر داده می‌شود:

$$V_H[n](\mathbf{r}, t) = \int d^3\mathbf{r}' \frac{n(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}, \quad (3)$$

که در آن، $n(\mathbf{r}, t)$ چگالی الکترون وابسته به زمان می‌باشد. پتانسیل تبدیلی-همبستگی $V_{xc}(\mathbf{r}, t)$ بر اساس LDA پیشنهاد شده توسط پردیو و زانگر بدست آمده است [۳۸]. پتانسیل خارجی ناشی از لیزر در پیماناه سرعت به صورت زیر تعریف شد:

$$V_{ext}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{c} p \cdot A(t) \quad (4)$$

که در آن، p عملگر تکانه، c سرعت نور و $A(t)$ پتانسیل برداری تپ لیزر را نشان می‌دهد. پتانسیل برداری یک لیزر تک رنگ به صورت زیر در نظر گرفته می‌شود:



$$\mathbf{A}(t) = A_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{T}\right) \left[\frac{1}{\sqrt{1+\varepsilon^2}} \cos(\omega_0 t + \phi) \hat{\mathbf{e}}_x + \frac{\varepsilon}{\sqrt{1+\varepsilon^2}} \sin(\omega_0 t + \phi) \hat{\mathbf{e}}_y \right] \quad (5)$$

که در آن، ω_0 فرکانس حامل، T طول زمانی کل تب، ε پارامتر بیضوی بودن نور لیزر است، و ϕ نشان دهنده فاز پوشش حامل (CEP) است. A_0 پتانسیل برداری دامنه است که به شدت (I) و فرکانس حامل (ω_0) لیزر ($A_0 = \frac{\sqrt{I_0}}{\omega_0}$) مربوط می شود.

محاسبه طیف هماهنگ‌های مرتبه بالا، معادله کوهن-شم با رهیافت نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان و با استفاده از نرم‌افزار محاسباتی اختاپوس حل می‌شود. در قدم بعدی جریان $\mathbf{j}(r, t)$ از تابع موج وابسته به زمان محاسبه شد [۷].

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -n(\mathbf{r}, t) \nabla V_{KS}(\mathbf{r}, t) + \Pi^{\text{kin}}(\mathbf{r}, t) + \Pi^{\text{int}}(\mathbf{r}, t), \quad (6)$$

در رابطه بالا، $\Pi^{\text{kin}}(\mathbf{r}, t)$ و $\Pi^{\text{int}}(\mathbf{r}, t)$ به ترتیب تانسور انرژی جنبشی و تانسور کشش اندازه حرکت هستند که معادله قانون بقای تکانه را بیان می‌کند. این رابطه بیانگر آن است که برای تعیین چگالی جریان فقط برهمکنش خارجی نقش دارد و طبق قانون سوم نیوتن سهم دو جمله آخر صفر می‌شود. از این رو، جریان کل از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} d^3 \mathbf{r} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = - \int_{\Omega} d^3 \mathbf{r} n(\mathbf{r}, t) \nabla V_{KS}(\mathbf{r}, t), \quad (7)$$

در رابطه (۷)، Ω حجم کل سامانه فیزیکی بر اساس قضیه دیورژانس است. از این رو، دینامیک چگالی جریان، وابسته به چگالی الکترونی وابسته به زمان $n(\mathbf{r}, t)$ و تغییرات پتانسیل کوهن-شم وابسته به زمان سامانه است. از این رو، از رابطه زیر می‌توان طیف هماهنگ مراتب بالا را به دست آورد:

$$S_{\text{tot}}(\omega) = \left| \text{FT} \left\{ \int_{\Omega} d^3 \mathbf{r} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) \right\} \right|^2. \quad (8)$$

تعداد کل الکترون‌های برانگیخته به این صورت تعریف می‌شود که تابع موج زمانی $|\psi_n(t)\rangle$ از تصویر تابع موج حالت پایه $|\psi_{n'}^{GS}\rangle$ بدست می‌آید [۱۶]:

$$N_{\text{ex}}(t) = N_e - \frac{1}{N_k} \sum_{\text{oc}}^{n, n'} \sum_{\text{oc}}^k |\langle \psi_{n, k}(t) | \psi_{n', k}^{GS} \rangle|^2, \quad (9)$$



در حالی که، N_e تعداد کل الکترون‌های داخل سامانه و N_k تعداد کل نقاط فضای وارون است که در ناحیه بریلوئن استفاده می‌شود. جمع روی تمامی شاخص‌های نواری n و n' بسته شده و دینامیک توزیع تعداد الکترون‌های برانگیخته از رابطه زیر بدست می‌آید [۱۶]:

$$N_{ex}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{N_k} \left(N_e - \sum_{occ}^{n, n'} |\langle \psi_{n, \mathbf{k}}(t) | \psi_{n', \mathbf{k}}^{GS} \rangle|^2 \right). \quad (10)$$

بازده هماهنگ برای مرتبه هماهنگ n ام توسط یک انتگرال بر روی طیف هماهنگ در حوزه فرکانس از $(n-0.5)\omega$ تا $(n+0.5)\omega$ محاسبه می‌شود [۱۶].

$$I_{HH,i}(n) = \int_{(n-0.5)\omega_0}^{(n+0.5)\omega_0} S_i(\omega') d\omega'.$$

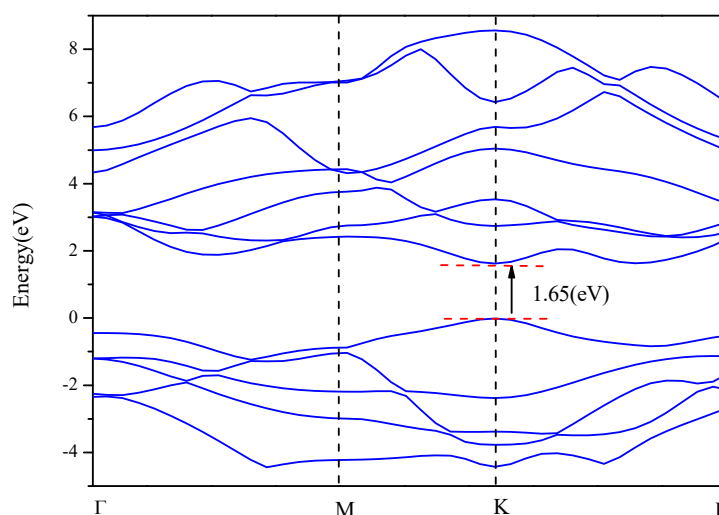
به منظور محاسبه قطبش هماهنگ‌های خروجی، هماهنگ با قطبش دایروی به صورت برهم نهی مولفه‌های X و Y هماهنگ خروجی، $S_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(S_x \pm iS_y)$ ، تعریف شده و بدین ترتیب قطبش هماهنگ خروجی به صورت زیر بدست می‌آید [۳۸]:

$$\epsilon = \frac{|S_+| - |S_-|}{|S_+| + |S_-|}. \quad (11)$$

برای حل معادله کوهن-شم وابسته به زمان و بدست آوردن چگالی جریان، از نرم افزار اختاپوس استفاده شده است [۳۹]. یک شبکه یکنواخت نقطه k به عنوان منطقه بریلوئن با استفاده از شبکه $1 \times 28 \times 28 k$ نقطه به صورت بهینه ایجاد می‌شود. گام مکانی 0.3 a.u. در فضای حقیقی و یک گام زمانی 0.1 a.u. در محاسبات در نظر گرفته شده است. برای ساختن ساختار تناوبی تک لایه WSe_2 ، ثابت‌های شبکه بر اساس داده‌های تجربی در نظر گرفته شده‌اند ($a=b=3.789 \text{ \AA}$) و \mathbf{a} و \mathbf{b} برای $c=12/28$ [۴۰]. همچنین، بر اساس محاسبات ساختار نواری، شکاف نواری مستقیم 1.65 eV برای تک لایه WSe_2 بدست آمد که به خوبی با مقدار تجربی (1.65 eV) هماهنگی دارد [۴۱]. این نتایج تأیید می‌کند که فضای محاسباتی و پارامترهای انتخاب شده در رویکرد محاسبات منجر به نتایج قابل اعتمادی می‌شود. در ادامه، نتایج شبیه‌سازی برای مطالعه رفتار WSe_2 در تعامل با میدان لیزر با طول موج 1600 نانومتر، شدت تپ لیزر $I=0.1 \text{ TW/cm}^2$ و پهنای زمانی کل تپ 74 فمتوثانیه است، ارائه می‌شود.

۳. نتایج محاسبات

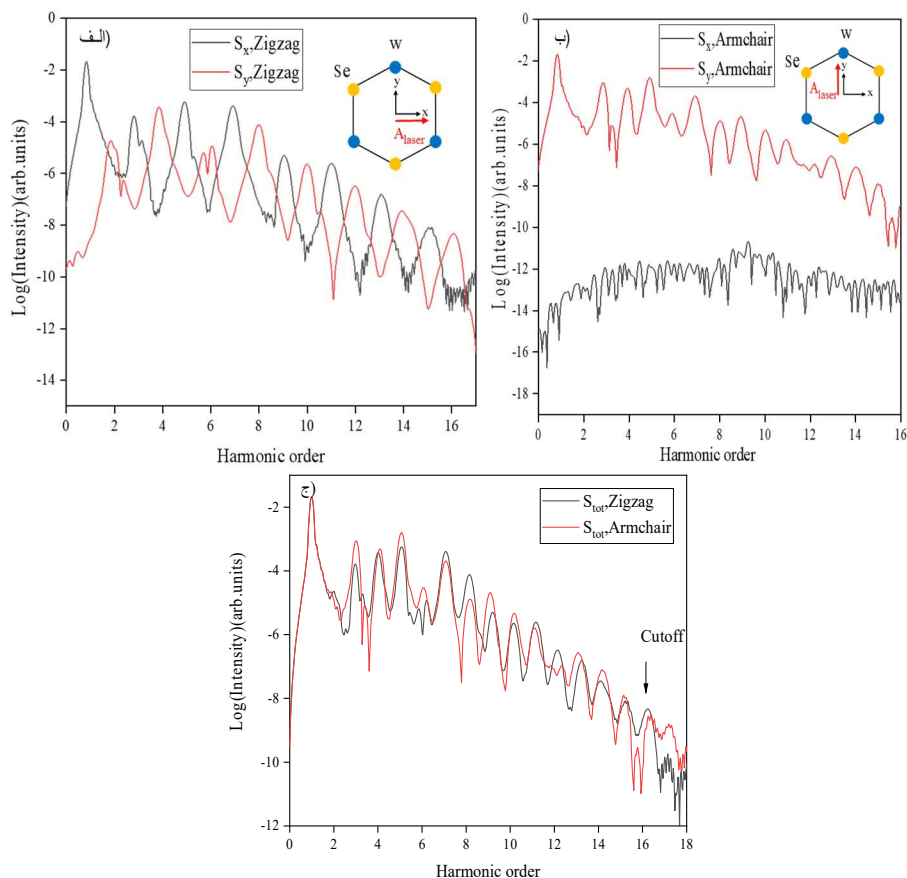
ابتدا ساختار نواری WSe_2 در حالت پایه محاسبه شده است و نتایج مربوطه در شکل (۱) مشاهده می‌شود. همانطور که از شکل (۱) ملاحظه می‌شود شکاف نواری ساختار WSe_2 برابر با ۱/۶۵ الکترون ولت است که با منبع [۴۱] هم‌خوانی کاملی دارد.



شکل ۱ ساختار نواری WSe_2 که در تقریب LDA محاسبه شده است.

پس از محاسبه ساختار نواری در حالت پایه، طیف هم‌هنگ مرتب بالای ناشی از برهمکنش تک لایه WSe_2 با لیزر قطبیده خطی محاسبه شد. تپ لیزر فرودی یک تپ قطبیده خطی با پوش سینوسی است که با رابطه $E_L = E_{x0} \sin^2\left(\frac{\pi t}{T_{tot}}\right) \cos(\omega_0 t)$ توصیف می‌شود و در این رابطه T_{tot} زمان کل و ω_0 فرکانس اولیه تپ فرودی است. تپ لیزر فرودی دارای شدت ۰/۵ تراوات بر سانتی‌متر مربع و طول موج ۱۶۰۰ نانومتر با تعداد ۱۴ چرخه اپتیکی و زمان کل تپ ۷۴ فمتوثانیه است. در شکل ۲(الف)، لیزر خطی موازی با جهت زیگزاگ (محور x) شبکه و در شکل ۲(ب)، موازی با جهت آرمیچر (محور y) است. همچنین، طیف هم‌هنگ مرتب بالا بدست آمده از برهمکنش میدان لیزر در دو راستای زیگزاگ و آرمیچر با ساختار WSe_2 در شکل ۲(ج) نمایش داده شده است.



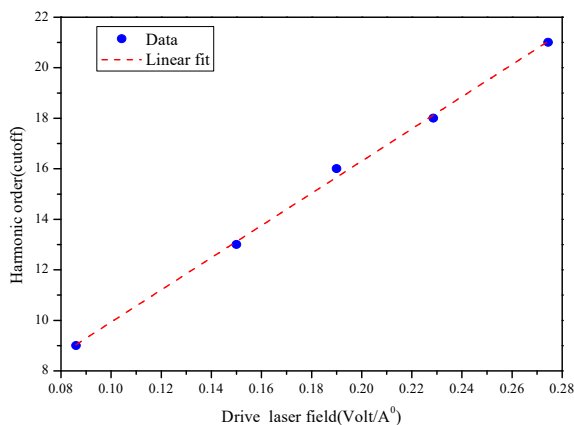


شکل ۲ (الف) طیف هماهنگ مراتب فرد در راستای X و مراتب زوج در راستای Y به ازای میدان لیزری فرودی در راستای زیگزاگ، (ب) طیف هماهنگ مراتب فرد در راستای X و مراتب زوج در راستای Y به ازای میدان لیزری فرودی در راستای آرمیچر، (ج) طیف هماهنگ مراتب بالا به ازای دو راستای آرمیچر و زیگزاگ در برهمکنش ساختار WSe_2 با لیزر فمتوثانیه با طول موج 1600 نانومتر و شدت 0.5 تراوات بر سانتی‌متر مربع.

همانطور که در شکل ۲(الف) مشاهده می‌شود، به ازای میدان لیزری در امتداد محور زیگزاگ در راستای محور X ، هماهنگ مراتب فرد و در راستای محور Y ، هماهنگ مراتب زوج مشاهده می‌شود. انتشار هماهنگ‌های زوج در امتداد محور Y (عمود بر قطبش لیزر) به دلیل جریان درون‌نواری غیرعادی (در امتداد محور Y) است که توسط انحنای بری سامانه هدایت می‌شود. فاصله $2\omega_0$ بین هماهنگ‌ها در هر دو جهت را می‌توان با دوره زمانی انتشار $T_0/2$ ناشی از تقارن بلوری درک

کرد. به عبارت دیگر، دینامیک جفت الکترون-حفره تولید شده در اوج مثبت و منفی میدان لیزر یکسان است.

همچنین، با مشاهده شکل ۲(ب)، با تنظیم قطبش لیزر در امتداد محور آرمیچر (محور y)، هماهنگ‌ها فقط در امتداد همان جهت ساطع می‌شوند و هیچ گسیلی در جهت زیگزاگ مشاهده نمی‌شود. هماهنگ قطع در امتداد محور آرمیچر تا هماهنگ ۱۶ گسترش یافته و شامل هر دو مرتبه هماهنگ زوج و فرد است که بر اساس تقارن بلوری انتظار می‌رود. در حقیقت، جفت‌های الکترون-حفره تولید شده در قله میدان مثبت و آن‌هایی که در دره میدان منفی تولید می‌شوند، دینامیک متفاوتی را تجربه می‌کنند. از این رو، دوره زمانی چگالی جریان و انتشار هماهنگ T_0 است $(j(t + T_0) = j(t))$. این منجر به فاصله ω_0 بین هماهنگ‌ها در حوزه فرکانس و مشاهده مرتبه هماهنگ زوج و فرد می‌شود. در شکل ۲(ج)، طیف کل هماهنگ مراتب بالا نشان داده است و در آن مشخص می‌شود هماهنگ قطع، هماهنگ مرتبه ۱۶ام است. با افزایش دامنه میدان الکتریکی هماهنگ قطع به صورت خطی تغییر می‌کند. این نتیجه در شکل (۳) نشان داده شده است.

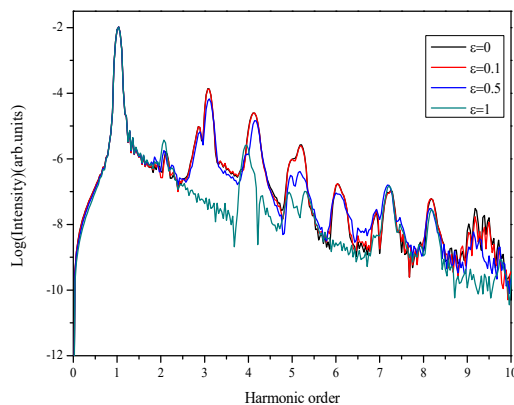


شکل ۳ هماهنگ قطع به ازای افزایش دامنه میدان الکتریکی که به صورت خطی افزایش می‌یابد.

همانطور که از شکل (۳) ملاحظه می‌شود، به ازای تغییر دامنه میدان لیزری، هماهنگ قطع به صورت خطی $HHG_{cutoff} \propto \lambda E$ تغییر می‌کند که توافق خوبی با نتایج گزارش شده دارد [۱۴]. این درحالی است که در سامانه‌های اتمی و مولکولی هماهنگ قطع از رابطه $\hbar\omega_{cutoff} = I_p + 3/17 U_p$ بدست می‌آید. نتیجه فیزیکی قابل بحث در شکل (۳) این است که انرژی قطع به صورت خطی به میدان لیزر محرک بستگی دارد. افزون بر این، وابستگی انرژی قطع به طول موج لیزر هنوز

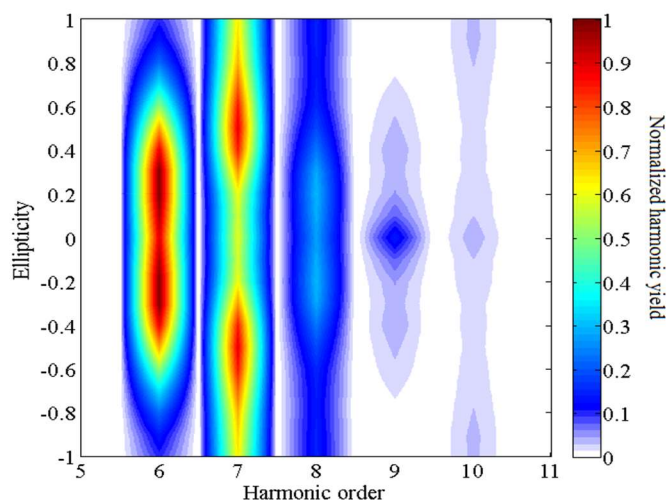


دقیقاً تعیین نشده است و برای اهداف مختلف متفاوت است. بر اساس یافته‌های در شکل (۳)، می‌توان نتیجه گرفت که فرکانس قطع به صورت $\sqrt{I}\lambda$ مقیاس‌بندی شده است که با مطالعات قبلی هماهنگی خوبی دارد. بر اساس این مطالعات، در یک سامانه دو یا چند سطحی با شکاف باند E_g که توسط لیزری با طول موج λ و قدرت میدان E_0 هدایت می‌شود، انرژی قطع از دیدگاه نظری به صورت
$$\epsilon_{\text{cutoff}} = \sqrt{(E_g)^2 + \left(\frac{d_{cv}E_0\lambda}{\pi c}\right)^2} \propto E_0\lambda$$
 تخمین زده می‌شود [۲۱]، جایی که d_{cv} عملگر گشتاور دوقطبی الکتریکی است که بین نوارهای ظرفیت و رسانش اتفاق می‌افتد و از رابطه $d_{m'm}(k) = i\langle u_{m',k} | \nabla_k | u_{m,k} \rangle$ در سامانه‌های نیمه‌هادی محاسبه می‌گردد [۴۲]. از این رو، می‌توان نتیجه گرفت که هماهنگ قطع به صورت خطی با شدت میدان الکتریکی متناسب است. مطالعاتی در مورد بستگی خطی هماهنگ قطع با طول موج وجود دارد که نشان می‌دهد رابطه آن‌ها به صورت خطی است [۲۱]. در ادامه، اثر قطبش بیضوی میدان لیزر ورودی بر طیف هماهنگ مراتب بالا در شدت $I=0.1 \text{ TW/cm}^2$ در نظر گرفته شده و پارامتر بیضی (ϵ) از مقدار صفر تا یک اسکن شده و طیف هماهنگ مراتب بالا بدست آمده با بیضی‌های مختلف مقایسه شده است.



شکل ۴ طیف هماهنگ مراتب بالا به ازای میزان الپتیسیته‌های مختلف در شدت 0.1 تراوات بر سانتی‌متر مربع و طول موج 1600 نانومتر محاسبه شده است.

با مشاهده شکل طیف هماهنگ مراتب بالا در شکل (۴)، ملاحظه می‌شود شدت هماهنگ‌های مختلف دچار تغییر شده و بازده هماهنگ‌ها به ازای تغییر میزان الپتیسیته دچار تغییر می‌شود که نتیجه این محاسبات در شکل (۵) آمده است.

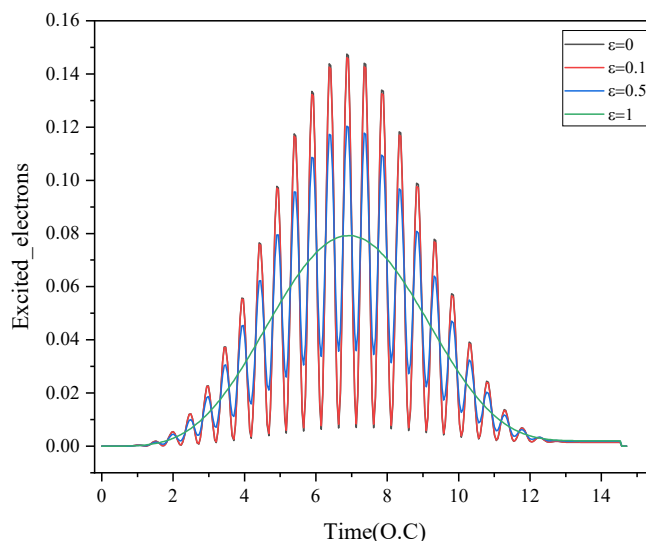


شکل ۵ بازده هماهنگ به ازای تغییر الیپتیسیته از ۱- تا ۱ در شدت یک دهم تراوات بر سانتی متر مربع محاسبه شده است.

شکل (۵) نشان می‌دهد که بازده مرتبه‌های هماهنگ مختلف به عنوان تابعی از بیضی بودن لیزر محرک متفاوت است. به صورتی که با افزایش قطبش بیضوی تا الیپتیسیته $0/5$ بازده هماهنگ به ازای هماهنگ مرتبه ۶ ام افزایش می‌یابد اما با افزایش مرتبه هماهنگ تا مرتبه ۱۰ ام بازده هماهنگ به ازای قطبش خطی بیشینه است. با توجه به رابطه (۱۱)، برای بیان بازده هماهنگ، در هماهنگ مرتبه ۶ ام به ازای تپ قطبیده بیضوی با الیپتیسیته $0/5$ مقدار بیشتری نسبت به تپ خطی است اما به ازای هماهنگ مرتبه ۸ و ۹ و ۱۰ ام، سطح زیر نمودار هماهنگ به ازای تپ قطبیده خطی بیشتر است. برای توضیح چنین رفتارهای متفاوتی باید یادآور شد که طیف هماهنگ مراتب بالا در جامدات از دو سازوکار سرچشمه می‌گیرد، سازوکار بین نواری که مربوط به باز ترکیب مستقیم الکترون-حفره است و دینامیک درون نواری که در آن حامل‌ها در نوارها توسط میدان لیزری شتاب داده می‌شوند. این دو سازوکار به صورت متفاوتی به میزان بیضوی بودن میدان لیزر اعمال شده بستگی دارند. انتشار بین نواری تنها به انتقال نوری بین سطوح انرژی موجود بستگی دارد. در حالت ایده‌آل ساده شده، انتشار هماهنگ‌ها توسط یک سازوکار بین نواری خالص، تنها الکترون‌ها انتقال را انجام می‌دهند، جدا از اینکه چگونه توسط میدان لیزر در فضای تکانه هدایت می‌شوند. این بدان معنی است که قطبش‌های بیضوی چپ و راست نباید به صورت متفاوتی به سازوکار بین نواری کمک کنند، چرا که در هر دو مورد قدرت میدان و بنابراین تحریک الکترون یکسان است. سازوکار درون نواری به

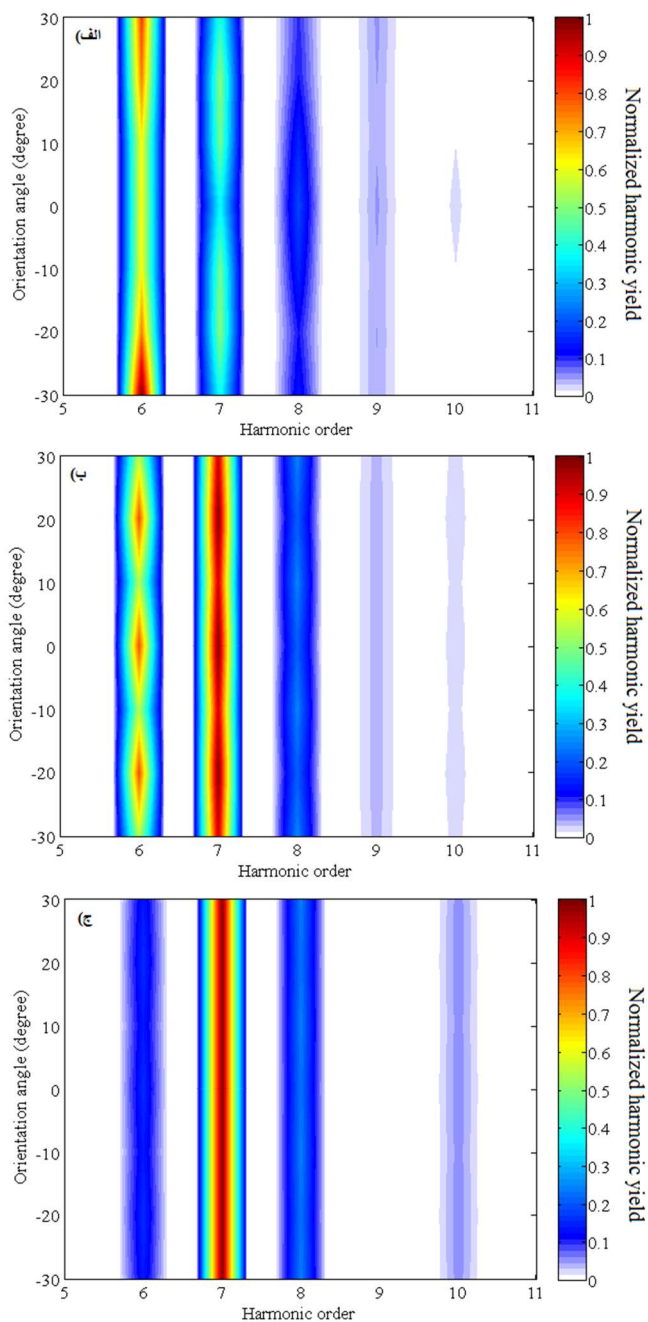


صورت مستقیم پراکندگی نوارهای رسانش (یعنی سرعت گروهی بسته موج الکترونی در فضای تکرانه) را بررسی می‌کند. برای هماهنگ مراتب بالا در جامدات، فعل و انفعال پیچیده بین سازوکارهای بین نواری و درون نواری منجر به وزن متفاوت برای هر هماهنگ می‌شود، بنابراین طبیعی است که انواع پروفایل‌های بیضوی برای مرتبه‌های هماهنگ مختلف از یک بلور پیدا کنیم، همانطور که به صورت ویژه در شکل (۵) نشان داده شده است. با توجه به این موضوع که قطبش تپ لیزر بر نرخ انتقال بار و در نتیجه بر تعداد الکترون‌های برانگیخته اثر می‌گذارد، این موضوع منجر به تفاوت در بازده هماهنگ‌های مختلف می‌شود.



شکل ۶ تعداد الکترون‌های برانگیخته به ازای افزایش میزان قطبش تپ لیزر ورودی را نمایش می‌دهد.

با محاسبه تعداد الکترون برانگیخته بر اساس رابطه (۱۰)، مشخص گردید با افزایش میزان قطبش نور به سمت قطبش دایروی تعداد الکترون‌های برانگیخته کاهش می‌یابد. در حقیقت، به ازای افزایش الیپتیسیته میزان نوسان تعداد الکترون‌های برانگیخته کاهش یافته است. به صورتی که به ازای قطبش دایروی بیشینه تعداد الکترون‌های برانگیخته برابر 0.08 (a.u.) است، اما در قطبش خطی بیشینه تا دو برابر نوسان می‌کند. این تغییر به نوبه خود اثر خود را در طیف هماهنگ در شکل (۳) و در بازده هماهنگ‌ها می‌گذارد. با تغییر زاویه چرخش تپ قطبیده بیضوی اطراف محور زیگزاگ از 30° - درجه تا 30° + درجه بازده هماهنگ مراتب بالا به ازای الیپتیسیته 0.1 ، 0.5 و 1 در شکل (۷) بر اساس رابطه (۱۱) محاسبه شده است.



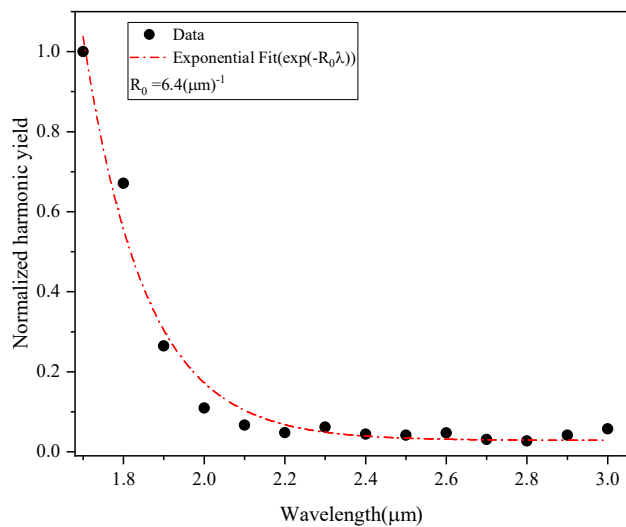
شکل ۷ بازده هماهنگ مراتب بالا به ازای تپ قطبیده بیضوی از زاویه -30° تا 30° درجه در (الف) $\varepsilon = 0/1$ ، (ب) $\varepsilon = 0/5$ و (ج) $\varepsilon = 1$.



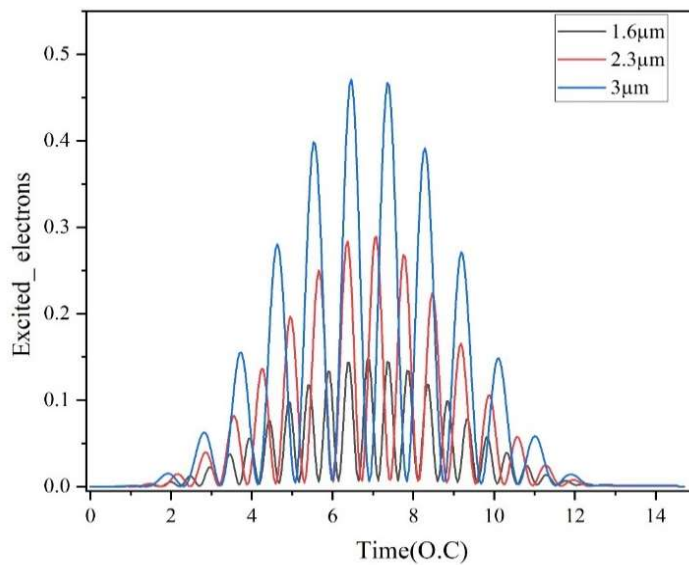
همانطور از شکل (۷) ملاحظه می‌شود با تغییر زاویه چرخش قطبش پرتو لیزر بازده هماهنگ در الیپتیسیته $0/1$ به ازای زاویه چرخش 30° درجه در هماهنگ مرتبه ۱۶م بازده افزایش می‌یابد. این در حالی است که با افزایش مرتبه هماهنگ‌ها به ویژه هماهنگ‌های مراتب ۸، ۹ و ۱۰م تنها به ازای زاویه چرخش صفر درجه بیشترین بازده هماهنگ مراتب بالا مشاهده می‌شود که این نتیجه به دلیل تعداد الکترون‌های برانگیخته است و نتایجی مشابه با شکل (۶) بدست می‌آید. با افزایش میزان الیپتیسیته به $0/5$ بازده به ازای زوایای 20° + درجه و 20° - درجه بیشینه خواهد بود و این نتیجه کمابیش به ازای هماهنگ تا مرتبه ۱۹م اتفاق می‌افتد. به ازای قطبش دایروی، تغییر زاویه چرخش، کمک چندانی به بهبود بازده هماهنگ نخواهد کرد، چرا که تعداد الکترون‌های برانگیخته تغییر نخواهد کرد.

یکی دیگر از پارامترهای تاثیرگذار بر طیف هماهنگ مراتب بالا اثر افزایش طول موج بر بازده هماهنگ مراتب بالا است. در شکل (۸)، بازده هماهنگ به ازای افزایش طول موج در بازه ۲ تا ۴ الکترون ولت نمایش داده شده است. بازده هماهنگ مراتب بالا به ازای افزایش طول موج در بازه ۲ تا ۴ الکترون‌ولت به صورت نمایی کاهش می‌یابد. این نتایج توافق خوبی با نتایج گزارش شده دارد [۲۶]. با افزایش طول موج لیزر فرودی، پتانسیل برداری دامنه افزایش یافته که این افزایش دامنه منجر به افزایش تعداد الکترون‌های برانگیخته می‌گردد. از این رو، انتظار افزایش بازده وجود دارد، اگرچه افزایش الکترون‌های برانگیخته سبب افزایش تعداد برخوردها شده و این برخوردها سبب افزایش پراکندگی شده، در نتیجه منجر به کاهش بازده خواهد شد.

برخوردها ناشی از افزایش تعداد الکترون‌های برانگیخته به ازای افزایش طول موج است که در شکل (۹) نمایش داده شده است. با توجه به شکل (۹) ملاحظه می‌شود که با افزایش طول موج تعداد الکترون‌های برانگیخته افزایش یافته است. با بررسی مقدار بیشینه تعداد الکترون‌های برانگیخته نسبت به افزایش طول موج مشاهده می‌شود که با افزایش طول موج تعداد الکترون‌های برانگیخته به صورت نمایی افزایش خواهد یافت. این بررسی در شکل (۱۰) نمایش داده شده است.

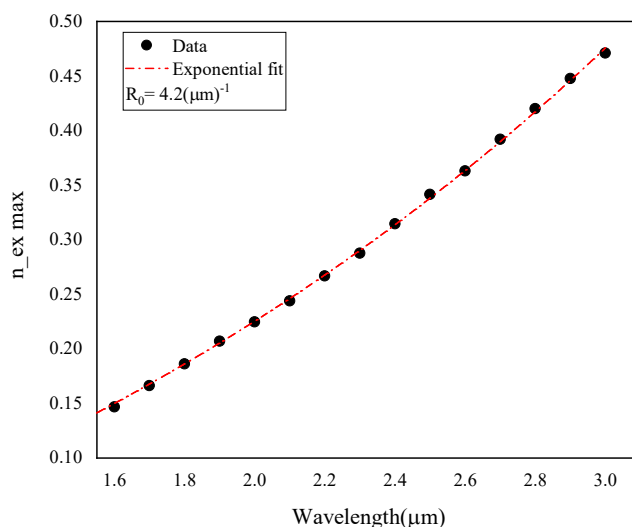


شکل ۸ بازده هماهنگ مراتب بالا به ازای تپ قطبیده خطی در بازه طول موجی ۱/۷ میکرومتر تا ۳ میکرومتر را نمایش می دهد.



شکل ۹ تعداد الکترون های برانگیخته به ازای افزایش طول موج را نمایش می دهد.





شکل ۱۰ تعداد بیشینه الکترون‌های برانگیخته به ازای افزایش طول موج به صورت نمایی افزایش می‌یابد.

برای توضیح فیزیکی رفتار وابستگی طول موج طیف هماهنگ مراتب بالا، می‌توان به وابستگی نرخ تونل‌زنی به طول موج در مرحله یونش اشاره کرد. با توجه به فرمول تونل‌زنی لاندائو-زرنر، نرخ تونل‌زنی متناسب است با:

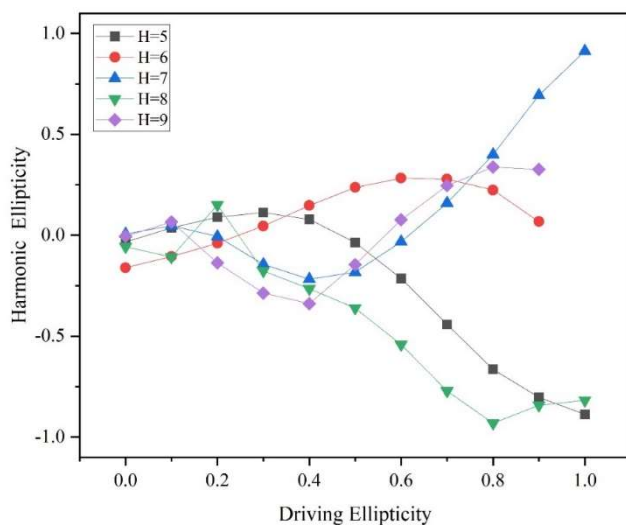
$$P^k \propto \exp \left[- \frac{E_g^k}{8|E \cdot d_{cv}^k|} \right] \quad (12)$$

که در آن، E و d_{cv} به ترتیب عنصر ماتریس دو قطبی و قدرت میدان لیزر هستند. با جایگزینی مقدار این پارامترها $E = 0.0017a.u \cdot \hat{x}$ ، $E_g = 0.06a.u.$ و $d_{cv} = 5.7(\hat{x} + \hat{y})(a.u.)$ از محاسبات DFT بدست آمده، مقیاس نرخ تونل‌زنی به صورت $P^k \propto$

$$\exp(-6.4\lambda)$$

تغییر می‌کند [۴۳].

پس از بررسی بازده هماهنگ مراتب بالا، یکی دیگر از پارامترهای تاثیر گذار بر ویژگی‌های تقارنی سامانه، میزان قطبش هماهنگ مراتب بالا است که در این بخش مورد بررسی قرار گرفته است. در شکل (۱۱)، تقارن هماهنگ مراتب بالا به ازای شدت ۰/۱ تراوات بر سانتی‌متر مربع و طول موج ۱۶۰۰ نانومتر به ازای الپتیسیته‌های مختلف مورد بحث قرار گرفته است.



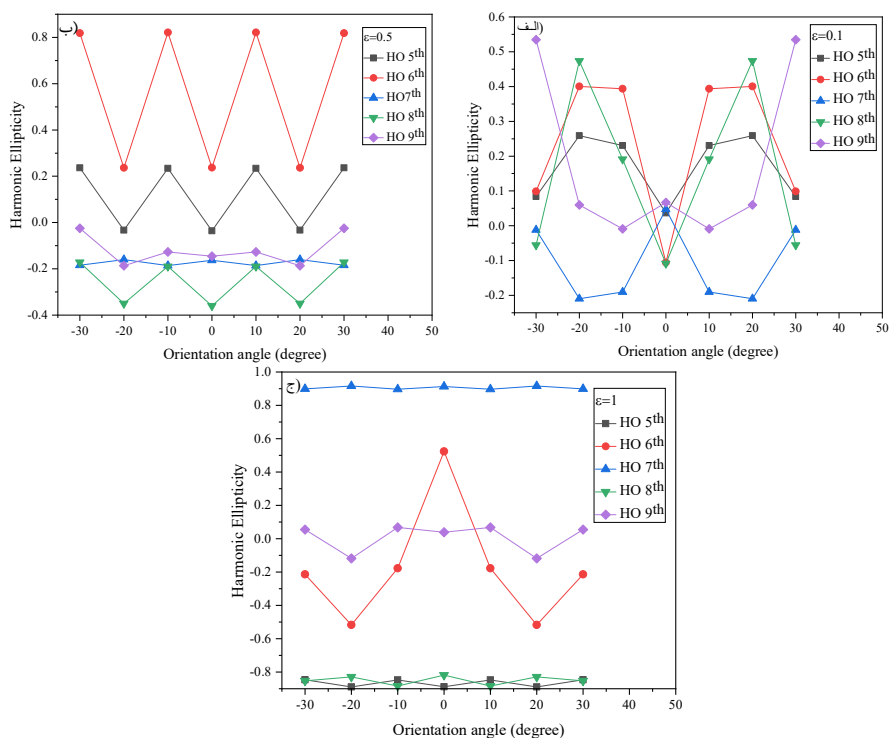
شکل ۱۱ قطبش هماهنگ خروجی به ازای تپ قطبیده بیضوی در راستای محور زیگزاگ را نمایش می‌دهد.

با افزایش میزان الیپتیسیته از قطبش خطی به دایروی قطبش هماهنگ مراتب بالا نیز در همین بازه دچار تغییر می‌شود که هم خوانی قابل ملاحظه‌ای با نتایج ارائه شده در منبع [۳۹] دارد. دلیل فیزیکی این امر از این حقیقت ناشی می‌شود که میزان قطبش هماهنگ مراتب بالا از دو عامل سرچشمه می‌گیرد. سازوکار درون نواری هماهنگ‌های زیر شکاف نواری را شامل می‌شود که بر اساس شکل (۳) هماهنگ مرتبه اول و دوم است. این هماهنگ‌ها رفتار قطبشی و بازده آن‌ها مشابه سامانه‌های اتمی است اما هماهنگ‌های مرتبه سوم به بعد ناشی از سازوکار بین نواری است و رفتاری شبیه به سامانه‌های اتمی ندارند. در این حالت قطبش هماهنگ‌های بعد از شکاف نواری ناشی از جریان بین نواری و $JDOS(\omega) \propto \sum_{v,c} \sum'_k \delta(E_{c,k} - E_{v,k} - \omega)$ است. به صورتی که در هماهنگ مرتبه هفتم سهم قطبش بین نواری بسیار قوی‌تر از قطبش در سایر هماهنگ‌ها است. همچنین، در تمامی هماهنگ مشاهده شده به ازای تپ قطبیده خطی قطبش خروجی هماهنگ خطی و به ازای تپ ورودی با قطبش دایروی، قطبش هماهنگ خروجی برابر با قطبش دایروی چپ گرد و راست گرد است که در شکل (۱۱) نشان داده شده است. این میزان محاسبه قطبش هماهنگ‌های خروجی این امکان را فراهم می‌آورد که بتوان راستای انتشار و ارتعاش هماهنگ خروجی را حدس زد. نتایج بالا با منبع [۳۱] هماهنگی خوبی دارد.

بعد از بررسی قطبش هماهنگ خروجی به ازای تپ قطبیده بیضوی در راستای محور زیگزاگ، زاویه چرخش قطبش بیضوی را تغییر می‌دهیم. نتایج این بررسی در شکل (۱۲) نمایش داده شده



است. همانطور که از شکل (۱۲) ملاحظه می‌شود، به ازای الپتیسیته $0/1$ قطبش هماهنگ‌های مشخص شده در زاویه چرخش صفر درجه بین $-0/1$ و $+0/1$ است. با تغییر زاویه چرخش میزان قطبش هماهنگ به سمت الپتیسیته‌های با اندازه بزرگ‌تر تغییر می‌کند. دلیل این امر از این حقیقت ناشی می‌شود که همانند محاسبه بازده هماهنگ، که در شکل (۶) توضیح داده شد، ناشی از افزایش تعداد الکترون‌های برانگیخته است که به خودی خود افزایش نرخ گذار بین نواری را نمایش می‌دهد. با افزایش میزان الپتیسیته به $0/5$ و تغییر زاویه قطبش ورودی میزان قطبش هماهنگ روندی تناوبی پیدا می‌کند که مشابه حالت بازده هماهنگ در شکل (۶) است.



شکل ۱۲ قطبش هماهنگ‌های تولید شده به ازای چرخش تپ با قطبش بیضوی در سه الپتیسیته مختلف. در الف)

$\epsilon = 0.1$ (ب) و $\epsilon = 0.5$ (ج) و $\epsilon = 1$.

۴. نتیجه گیری

در این پژوهش ابتدا طیف هماهنگ مراتب بالای منتج از برهمکنش تک لایه WSe_2 با نور لیزر قطبیده خطی در دو راستای زیگزاگ و آرمیچربررسی گردید و تقارن طیف هماهنگ‌های منتج بررسی شد. سپس وابستگی هماهنگ قطع به دامنه میدان الکتریکی بررسی شد و مشخص گردید که هماهنگ قطع به صورت خطی نسبت به میدان الکتریکی افزایش می‌یابد. اثر قطبش میدان الکتریکی لیزر در هماهنگ قطع و بازده هماهنگ به عنوان یک پارامتر موثر بررسی شد که نتایج نشان‌دهنده تاثیر جزئی در هماهنگ قطع بود. اگرچه، تاثیر موثری در بازده هماهنگ ایجاد می‌کند به صورتی که با زاویه چرخش قطبش تب لیزر به 30° درجه در الیپتیسیته $0/1$ بیشینه بازده هماهنگ مراتب بالا بدست آمده است. نتایج مربوط به بررسی رفتار بازده هماهنگ نسبت به طول موج نیز نشان داد که بازده هماهنگ‌ها به صورت نمایی با افزایش طول موج افت پیدا می‌کند. در انتها نیز قطبش هماهنگ‌های مرتبه بالای منتج به ازای تب قطبیده بیضوی مورد تجزیه و بررسی قرار گرفت. در آن به ازای تب قطبیده خطی، قطبش هماهنگ خروجی نیز خطی بدست آمد و با تغییر قطبش تب لیزر فرودی به سمت دایروی، قطبش هماهنگ مراتب بالا نیز به صورت دایروی تغییر نمود، که قطبش نور ورودی به عنوان پارامتری برای امکان تشخیص و شناسایی قطبش هماهنگ‌های تولیدی محسوب می‌شود. محاسبات مربوطه به کمک نظریه تابعی چگالی وابسته به زمان و در فضای حقیقی انجام شده است.

منابع

- [1] Li, J., et al., Attosecond science based on high harmonic generation from gases and solids. *Nature Communications*, **11**(1): p. 1-13, 2020. <https://doi.org/10.1038/s41467-020-16480-6>
- [2] Li, J., et al., 53-attosecond X-ray pulses reach the carbon K-edge. *Nature communications*, **8**(1): p. 1-5, 2017. <https://doi.org/10.1038/s41467-017-00321-0>
- [3] Garg, M., H.-Y. Kim, and E. Goulielmakis, Ultimate waveform reproducibility of extreme-ultraviolet pulses by high-harmonic generation in quartz. *Nature Photonics*, **12**(5): p. 291-296, 2018. <https://doi.org/10.1038/s41566-018-0123-6>
- [4] Krausz, F. and M. Ivanov, Attosecond physics. *Reviews of modern physics*, **81**(1): p. 163, 2009.
- [5] Shiner, A., et al., Wavelength scaling of high harmonic generation efficiency. *Physical Review Letters*, **103**(7): p. 073902, 2009. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.073902>
- [6] Sansone, G., L. Poletto, and M. Nisoli, High-energy attosecond light sources. *Nature Photonics*, **5**(11): p. 655-663, 2011. <https://doi.org/10.1038/nphoton.2011.167>



- [7] Tancogne-Dejean, N., et al., Impact of the electronic band structure in high-harmonic generation spectra of solids. *Physical review letters*, **118**(8): p. 08740., 2017. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.118.087403>
- [8] Kleinman, D.A., A. Ashkin, and G. Boyd, Second-harmonic generation of light by focused laser beams. *Physical Review*, **145**(1): p. 338, 1966. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.145.338>
- [9] McPherson, A., et al., Studies of multiphoton production of vacuum-ultraviolet radiation in the rare gases. *JOSA B*, **4**(4): p. 595-601, 1987. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.4.000595>
- [10] Lewenstein, M., et al., Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields. *Physical Review A*, **49**(3): p. 2117, 1994. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.49.2117>
- [11] Wegener, M., Extreme nonlinear optics: an introduction. *Springer Science & Business Media*, 2005
- [12] Golde, D., T. Meier, and S.W. Koch, High harmonics generated in semiconductor nanostructures by the coupled dynamics of optical inter-and intraband excitations. *Physical Review B*, **77**(7): p. 075330, 2008. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.075330>
- [13] Golde, D., T. Meier, and S.W. Koch, Microscopic analysis of extreme nonlinear optics in semiconductor nanostructures. *JOSA B*, **23**(12): p. 2559-2565, 2006. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.23.002559>
- [14] Ghimire, S., et al., Observation of high-order harmonic generation in a bulk crystal. *Nature physics*, **7**(2): p. 138-141, 2011. <https://doi.org/10.1038/nphys1847>
- [15] Hansen, K.K., T. Deffge, and D. Bauer, High-order harmonic generation in solid slabs beyond the single-active-electron approximation. *Physical Review A*, **96**(5): p. 053418, 2017. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.96.053418>
- [16] Tancogne-Dejean, N., et al., Ellipticity dependence of high-harmonic generation in solids originating from coupled intraband and interband dynamics. *Nature communications*, **8**(1): p. 1-10, 2017. <https://doi.org/10.1038/s41467-017-00764-5>
- [17] Nourbakhsh, Z., et al., High Harmonics and Isolated Attosecond Pulses from MgO. *Physical Review Applied*, **15**(1): p. 014013, 2021. <https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.15.014013>
- [18] Guan, M.-X., et al., Cooperative evolution of intraband and interband excitations for high-harmonic generation in strained MoS₂. *Physical Review B*, **99**(18): p. 184306, 2019. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.184306>
- [19] Tancogne-Dejean, N. and A. Rubio, Atomic-like high-harmonic generation from two-dimensional materials. *Science Advances*, **2**(4): p. eaao5207, 2018. <https://doi.org/10.1126/sciadv.aao5207>
- [20] Yoshikawa, N., et al., Interband resonant high-harmonic generation by valley polarized electron-hole pairs. *Nature communications*, **10**(1): p. 1-7, 2019. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-11697-6>
- [21] Wu, M., et al., High-harmonic generation from Bloch electrons in solids. *Physical Review A*, **91**(4): p. 043839, 2015. DOI: 10.1103/PhysRevA.91.043839
- [22] Vampa, G., et al., Linking high harmonics from gases and solids. *Nature*, **522**(7557): p. 462-464, 2015. DOI: 10.1038/nature14517
- [23] Luu, T.T., et al., Extreme ultraviolet high-harmonic spectroscopy of solids. *Nature*, **521**(7553): p 498-502, 2015. DOI: 10.1038/nature14456
- [24] Kira, M. and S.W. Koch, Semiconductor quantum optics. *Cambridge University Press*, 2011.
- [25] Liu, X., et al., Wavelength dependence of high-order harmonic yields in solids. *Physical Review A*, **98**(6): p. 063419, 2018. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.98.063419>



- [26] Vampa, G., et al., Theoretical analysis of high-harmonic generation in solids. *Physical review letters*, **113**(7): p. 073901, 2014. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.073901>
- [27] Wang, Z., et al., The roles of photo-carrier doping and driving wavelength in high harmonic generation from a semiconductor. *Nature communications*, **8**(1): p. 1-7, 2017. <https://doi.org/10.1038/s41467-017-01899-1>
- [28] Jiang, S., et al., Crystal symmetry and polarization of high-order harmonics in ZnO. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, **52**(22): p. 225601, 2019. <https://doi.org/10.1088/1361-6455/ab470d>
- [29] Kobayashi, Y., et al., Polarization flipping of even-order harmonics in monolayer transition-metal dichalcogenides. *Ultrafast Science*, 2021. <https://doi.org/10.34133/2021/9820716>
- [30] Tamaya, T., et al., Higher-order harmonic generation caused by elliptically polarized electric fields in solid-state materials. *Physical Review B*, **94**(24) :p. 241107, 2016. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.94.241107>
- [31] Klemke, N., et al., Polarization-state-resolved high-harmonic spectroscopy of solids. *Nature communications*, **10**(1): p. 1-7, 2019. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-09328-1>
- [32] Liu, Z., et al., Strain and structure heterogeneity in MoS₂ atomic layers grown by chemical vapour deposition. *Nature communications*, **5**(1): p. 1-9, 2014. <https://doi.org/10.1038/ncomms6246>
- [33] Castellanos-Gomez, A., et al., Local strain engineering in atomically thin MoS₂. *Nano letters*, **13**(11): p. 5361-5366, 2013. <https://doi.org/10.1021/nl402875m>
- [34] Liang, J., et al., Monitoring local strain vector in atomic-layered MoSe₂ by second-harmonic generation. *Nano letters*, **17**(12): p. 7539-7543, 2017. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b03476>
- [35] He, K., et al., Experimental demonstration of continuous electronic structure tuning via strain in atomically thin MoS₂. *Nano letters*, **13**(6): p. 2931-2936, 2013. <https://doi.org/10.1021/nl4013166>
- [36] Mak, K.F. and J. Shan, Photonics and optoelectronics of 2D semiconductor transition metal dichalcogenides. *Nature Photonics*, **10**(4): p. 216-226, 2016. <https://doi.org/10.1038/nphoton.2015.282>
- [37] Hartwigsen, C., S. Gødecke, and J. Hutter, Relativistic separable dual-space Gaussian pseudopotentials from H to Rn. *Physical Review B*, **58**(7): p. 3641, 1998. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.3641>
- [38] Sun, N., et al., Near-circularly-polarized attosecond pulse generation from carbon monoxide molecules with a combination of linearly and circularly polarized fields. *Physical Review A*, **101**(5): p. 053437, 2020. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.101.053437>
- [39] Tancogne-Dejean, N., et al., Octopus, a computational framework for exploring light-driven phenomena and quantum dynamics in extended and finite systems. *The Journal of chemical physics*, **152**(12): p. 124119, 2020. <https://doi.org/10.1063/1.5142502>
- [40] Zhao, W., et al., Electronic structure of exfoliated millimeter-sized monolayer WSe₂ on silicon wafer. *Nano Research*, **12**(12): p. 3095-3100, 2019. <https://doi.org/10.1007/s12274-019-2557-7>
- [41] Zhou, H., et al., Large area growth and electrical properties of p-type WSe₂ atomic layers. *Nano letters*, **15**(1): p. 709-713, 2015. <https://doi.org/10.1021/nl504256y>
- [42] Yue, L. and M.B. Gaarde, Structure gauges and laser gauges for the semiconductor Bloch equations in high-order harmonic generation in solids. *Physical Review A*, **101**(5): p. 053411, 2020. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.101.053411>
- [43] Yue, L. and M.B. Gaarde, Expanded view of electron-hole recollisions in solid-state high-order harmonic generation: Full-Brillouin-zone tunneling and imperfect



recollisions. *Physical Review A*, **103**(6): p. 063105, 2021.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.103.063105>



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).