

정렬된 브롬 분자를 이용한 고차조화파의 특성 연구

Characteristics of high-order harmonic generation from aligned Bromine molecules by intense femtosecond laser pulses

이계황^{1*}, 김태규², 이재혁², 박주윤¹, 이효철², 남창희¹

¹한국과학기술원 물리학과

²한국과학기술원 화학과

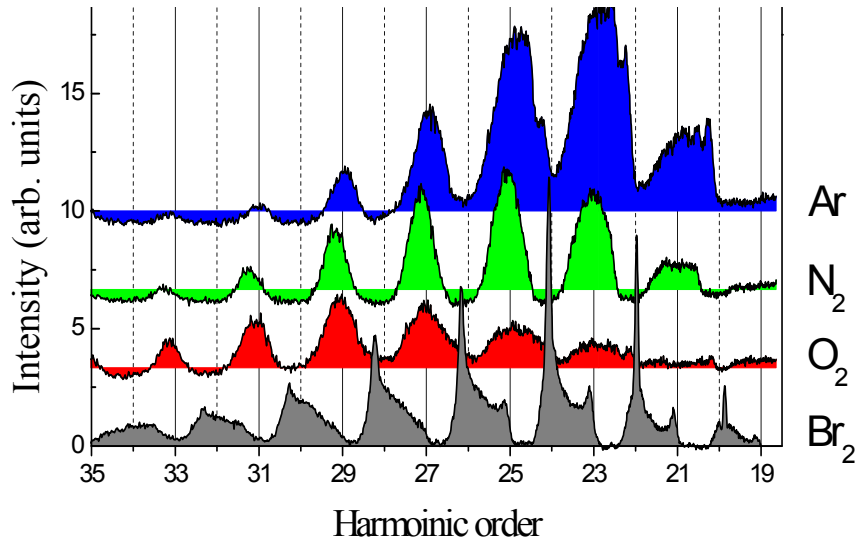
*momenta@kaist.ac.kr

고출력 펄스 레이저가 원자나 분자에 입사하여 레이저 파장의 홀수 배에 해당하는 파장을 가진 빛이 여러 차수에 걸쳐 발생하는 현상을 고차조화파라고 한다. 최근 들어 이원자 분자로부터 발생하는 고차조화파를 이용하여 분자의 동적 정렬(dynamic alignment)¹ 현상을 관찰하거나 분자의 최외각 전자의 분포를 재구성하는 연구와 같이 분자를 이용한 연구가 활발히 이루어지고 있다. 이에 본 연구에서는 다양한 크기의 이원자 분자들의 고차조화파를 관찰하고 각각의 분자들이 레이저 펄스에 의해 정렬되는 현상을 관찰하였다.

특히 순수한 브롬분자에서 발행한 고차조화파는 단원자 및 일반적인 이원자 분자로부터 발생한 고차조화파와는 다르게 스펙트럼 상에서 그림 [1]과 같이 double peak 구조가 나타난다. 일반적으로 고차조화파는 그 발생 원리에 의해 홀수차수에 해당되는 스펙트럼만 보이게 되는데, Br₂인 경우만 홀수, 짝수차수에 해당되는 주파수 성분을 가지고 있음을 볼 수 있다. 이는 원자 간의 거리가 먼 이원자 분자가 가지는 비대칭 퍼텐셜의 영향이라고 할 수 있다.

분자의 동적 정렬(dynamic alignment)이란 분자의 회전시간보다 훨씬 짧은 펄스 레이저를 분자에 입사시키면 분자는 레이저가 지나간 후에도 분자의 회전시간에 비례하는 특정한 시간마다 정렬을 하게 되는 양자역학적 현상이다. 표 [1]은 이원자 분자의 동적 정렬에 영향을 주는 변수들을 정리한 것이다. 브롬 분자는 산소, 이산화 탄소와 같은 HOMO (highest occupied molecular orbital)를 가지고 있으며, 질소처럼 0이 아닌 다른 핵스핀 값을 가질 수 있다. 이것으로 인해 브롬의 동적 정렬 구조는 질소나 산소와는 다른 형태를 가지게 된다. 그리고 브롬 분자로부터 발생하는 고차조화파의 double peak 구조를 이해하기 위해서 브롬을 동적 정렬 시켜 볼 것이다. 브롬 분자가 정렬되는 방향에 따라 발생하는 고차조화파의 변화를 살펴보면 double peak이 보이는 원리를 알 수 있을 것이다.

고차조화파의 double peak 구조가 나타나는 것과 정렬되는 것은 모두 원자에서는 볼 수 없는 현상이며 분자가 갖는 비대칭 퍼텐셜에 의한 효과이다. 따라서 분자에서 발생하는 고차조화파 연구는 분자의 구조와 그 특성을 이해하는 데 중요한 정보를 제공해 줄 것이다.



[그림 1] 기체 종류에 따른 고차조화파의 스펙트럼 비교

	M^* (g/mol)	R_e (Å)	B^* (m^{-1})	τ_{full} (ps)	HOMO	a. S.	m. S.
N_2	14.00	1.09	1.99	8.4	s_g	1	0, 1, 2
O_2	15.99	1.20	1.45	11.6	p_g	0	0
CO_2	15.99	2.32	0.39	42.7	p_g	0	0
Br_2	79.90	2.28	0.08	208	p_g	3/2	0, 3/2, 3

** M^* = mass of one atom,
 $B^* = B/hc$,
 τ_{full} = full revival time,
HOMO = Highest Occupied
Molecular Orbital,
a. S. = atomic nuclear spin,
m. S. = total molecular nuclear spin

[표 1] 이원자 기체의 동적 정렬에 영향을 주는 변수들

참고문헌

1. P. W. Dooley, I. V. Litvinyuk, Kevin F. Lee, D. M. Rayner, M. Spanner, D. M. Villeneuve, and P. B. Corkum, Phys. Rev. A **68**, 23406 (2003).