

# FOTODISSZOCIÁCIÓ SZABÁLYOZÁSA THZ PULZUSSAL INDUKÁLT STARK EFFEKTUSSAL

**Tóth A.<sup>1</sup>, Csehi A.<sup>2</sup>, Halász G. J.<sup>3</sup>, és Vibók Á.<sup>2,1</sup>**

<sup>1</sup>*ELI-ALPS, ELI-HU Non-Profit Ltd, H-6720 Szeged, Dugonics tér 13, Magyarország*

<sup>2</sup>*Elméleti Fizikai Tanszék, Debreceni Egyetem, H-4010 Debrecen, PO Box 5, Magyarország*

<sup>3</sup>*Információ Technológiai Tanszék, Debreceni Egyetem, H-4010 Debrecen, PO Box 12, Magyarország*

DOI: <https://doi.org/10.14232/kvantumelektronika.9.34>

## 1. Bevezetés

A lézertechnológia elmúlt évtizedekben történt folyamatos fejlődésének köszönhetően napjainkra femtoszekundumos vagy akár néhány attoszekundumos lézerpulzusok is a kutatók rendelkezésére állnak. Ezek a példátlan időfelbontást biztosító pulzusok elengedhetetlen kellékei a hasonló időskálán zajló fizikai folyamatok vizsgálatának. Ennek köszönhetően, a lézer-anyag kölcsönhatás tanulmányozása az egyik leggyorsabban fejlődő kutatási területté vált, amely számos új jelenség - mint például a magas felharmonikusok keltése vagy fotoionizáció és fragmentáció - felfedezéséhez vezetett.

Az atomok és molekulák belsejében lezajló dinamikai folyamatok megértése mellett egyre nagyobb hangsúlyt kap ezek ellenőrzött irányítása [1, 2]. Erre az egyik legnépszerűbb stratégia a dinamikus Stark effektus (DSE) használata. Az alkalmazott lézerfény frekvenciája szerint ez lehet rezonáns vagy nem-rezonáns. Az első esetben, molekulákra alkalmazva, az erős lézersugárzás képes csatolni két elektronállapotot a molekula átmeneti dipólusmomentumán keresztül. Ennek hatására elfajulások, úgynevezett kónikus keresztveződések jönnek létre, amelyeken keresztül lezajló nemadiabatikus folyamatok erőteljesen befolyásolják a molekula dinamikai, illetve spektroszkópiai tulajdonságait. A másik, nem-rezonáns esetben a lézerfény továbbra is képes jelentős dinamikai hatásokat kifejteni a potenciálisenergia-felületeknek (potential energy surface, PES) permanens dipólusmomentumon keresztül történő formálásával. Ezt a hatást átfogóan tanulmányozták az irodalomban, mivel egy általános eszközként szolgál atomi és molekuláris folyamatok kvantumszabályozására [3, 4]. A vizsgált rendszer tekintetében a dinamikus Stark effektus dipólus vagy Raman közelítésben írható le. A köztük lévő különbség abban nyilvánul meg, hogy míg a dipólus esetben a kölcsönhatás a lézer pillanatnyi elektromos terét követi, addig a Raman esetben a pulzus burkolóját.

A közelmúltban néhány kutatócsoport figyelme a terahertzes pulzusok felé irányult. Fleischer és munkatársai a molekulák egyciklusú THz pulzusok hatására történő irányítottságát vizsgálták [5]. Ugyanez a csoport tanulmányozta a térmentes forgási mozgás lecsengését a terahertzes mező által indukált molekuláris orientáción keresztül [6]. Kurosaki és munkatársai egy módszert javasoltak hullámcsomagok időbeli szétválasztására. Lineárisan poláros egyciklusú THz pulzusok segítségével sikerült szétválasztaniuk a <sup>133</sup>CsI és <sup>135</sup>CsI izotopológok keverékét [7]. Došlić egyciklusnál rövidebb THz impulzusokat használt elektronállapot függő populációtranszfer elérésére az ACAC molekulában [8].

A jelen munka a fent említett két irány ötvözése, azaz a molekulák viselkedését irányító Stark hatást terahertzes pulzusokkal keltjük. A hullámcsomagok dinamikájának részletes vizsgálatával igyekszünk meghatározni a rendszert befolyásoló fő mechanizmusokat és ezek nyomait olyan fizikai

mennyiségekben mint a fotofragmentumok szögeloszlása és kinetikus energia spektruma. Mindezt a lítium-fluorid (LiF) molekula példáján keresztül tesszük.

## 2. Módszer

A lítium-fluorid molekula az alkáli-halogenidek csoportjába tartozik. Ezek közös jellemzője a legalacsonyabban fekvő két  $1^1\Sigma^+$  elektronállapotuk közötti elkerült kereszteződés (avoided crossing, a továbbiakban AC), ami miatt a nemadiabatikus folyamatok tanulmányozásának népszerű kísérleti alanyaivá váltak. Korábbi eredményeinket alapul véve [9], a LiF molekulát, mint egy háromállapotú rendszert modellezzük, ahol az előbb említett  $1^1\Sigma^+$  és  $2^1\Sigma^+$  állapotok mellett az  $1^1\Pi$  elektronállapotot is figyelembe vesszük. A továbbiakban  $\Sigma_1$ ,  $\Sigma_2$  és  $\Pi_1$  néven hivatkozunk rájuk. A nekik megfelelő potenciálisenergia-görbék az 1.(a) ábrán láthatók, a  $\Sigma$  állapotokat az AC-nál összekötő csatolási taggal  $[\tau(R) = \langle \varphi_{\Sigma_1} | \frac{\partial}{\partial R} \varphi_{\Sigma_2} \rangle]$  együtt. Az ábra további paneljei a molekula (b) állandó  $[\mu_i(R) = -\langle \varphi_i | \sum_k r_k | \varphi_i \rangle]$  és (c) átmeneti  $[\mu_{ij}(R) = -\langle \varphi_i | \sum_k r_k | \varphi_j \rangle]$  dipólmomentumait (TDM) mutatja be. Fontos jellemzője az átmeneti dipólmomentumoknak, hogy míg a  $\Sigma_1$ - $\Sigma_2$  átmenetért felelős  $\vec{\mu}_{\Sigma_1\Sigma_2}$  párhuzamos a molekulatengellyel, addig a  $\Pi_1$  állapotot csatolóak merőlegesek erre az irányra.

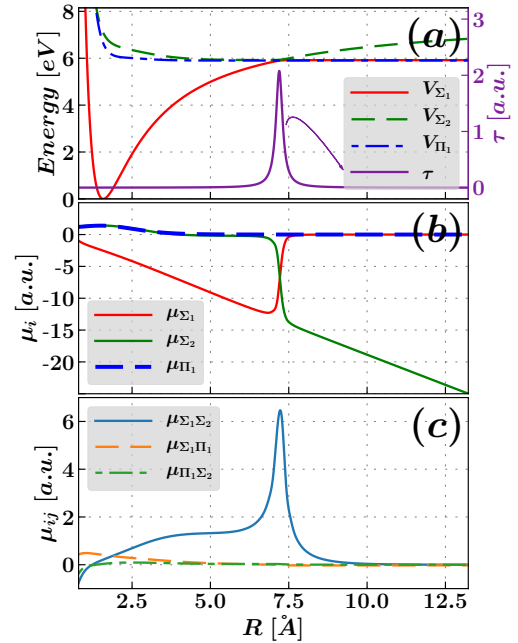
Előző munkáinkban [9] azt is megmutattuk, hogy a molekuladinamika valóságát leírásához a szimulációkban figyelembe kell vennünk a forgási szabadsági fokot. A terahertzes sugárzás köztudottan erős forgató hatását figyelembe véve, a jelen esetben ez hatványozottan érvényes. Ennek megfelelően a rendszer időfüggő Hamilton operátora a

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} T & 0 & K \\ 0 & T & 0 \\ -K & 0 & T \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_{\Sigma_1} - \mu_{\Sigma_1} \cos(\theta) E(t) & -\mu_{\Sigma_1\Pi_1} \sin(\theta) E(t) & -\mu_{\Sigma_1\Sigma_2} \cos(\theta) E(t) \\ -\mu_{\Sigma_1\Pi_1} \sin(\theta) E(t) & V_{\Pi_1} - \mu_{\Pi_1} \cos(\theta) E(t) & -\mu_{\Pi_1\Sigma_2} \sin(\theta) E(t) \\ -\mu_{\Sigma_1\Sigma_2} \cos(\theta) E(t) & -\mu_{\Pi_1\Sigma_2} \sin(\theta) E(t) & V_{\Sigma_1} - \mu_{\Sigma_2} \cos(\theta) E(t) \end{pmatrix} \quad (1)$$

alakban írható, ahol  $T$  a forgó-rezgő molekula kinetikusenergia operátora,  $K$  pedig az 1.(a) ábrán bemutatott  $\tau(R)$  csatolási tagból származtatott nemadiabatikus csatolási operátor [10].

A Hamilton operátor kifejezésében  $E(t)$  a lézertér pillanatnyi elektromos terének értékét jelöli. Számításaink során két lineárisan polarizált (azonos irányba mutató) pulzust használtunk. Az első egy 20 fs hosszú (félértékszélesség) pumpa pulzus, melynek fotonenergiája  $\hbar\omega_p = 6.94$  eV, míg intenzitása  $I_p = 5 \times 10^{12}$  W/cm<sup>2</sup> volt. Ez gerjesztette a kezdetben alapállapotban lévő molekulát, beindítva ezzel a fotodisszociációs folyamatot. A második, a kontroll pulzus, egy  $\hbar\omega_c = 0.037$  eV energiájú és  $I_c = 3.16 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup> intenzitású egyciklusú (félértékszélesség) terahertzes pulzus.

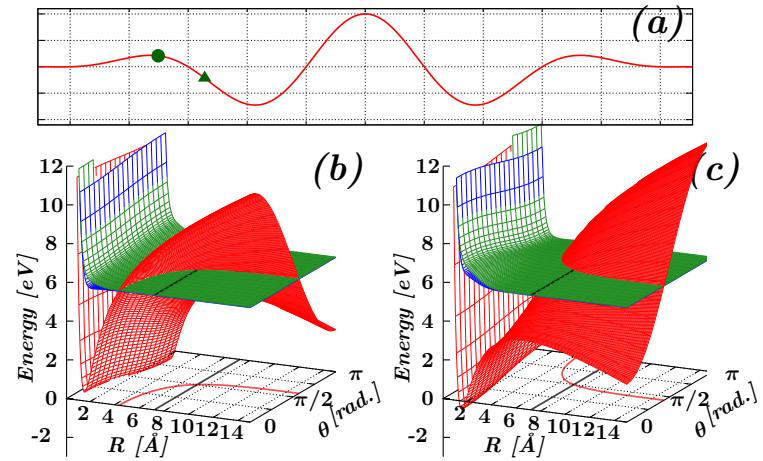
A maghullámfüggvény időfejlődését leíró Schrödinger-egyenletet az MCTDH (multi configuration time-dependent Hartree) módszer segítségével oldottuk meg. Ez egy hatékony eljárás, amely akár 25-30 módust is képes leírni. Esetünkben kétdimenziós számolásokra került sor az  $R$  rezgési és  $\theta$  forgási (molekulatengely és a lézer polarizációs iránya által bezárt szög) szabadsági fokok által meghatározott konfigurációs térben. A kapott hullámcsomagokból aztán kiszámoltuk az egyes elektronállapotok populációját, illetve a fragmentálódó részecskék szögeloszlását és kinetikusenergia spektrumát.



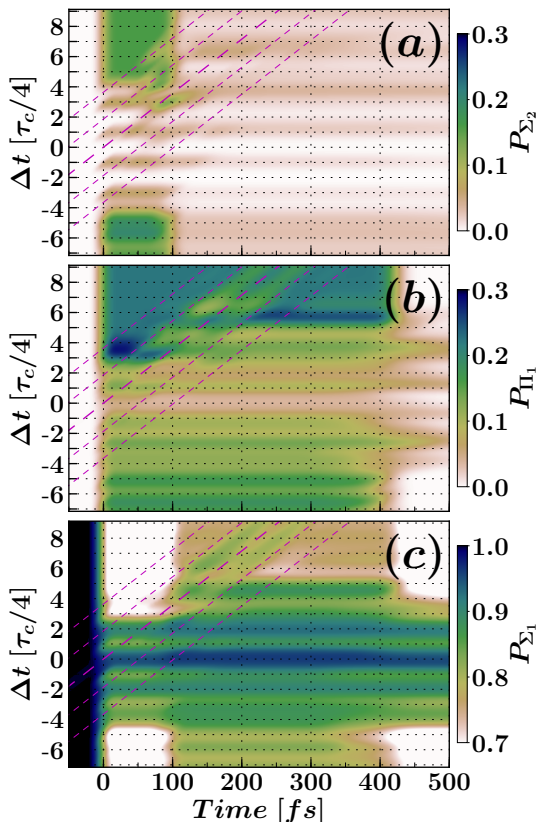
1. ábra. (a) LiF molekula legalacsonyabb három adiabatikus potenciálisenergia görbéje és a  $\Sigma$  állapotok közötti nemadiabatikus csatolási tag. (b) A három állapot permanens dipólmomentuma. (c) A különböző állapotok közötti átmeneti dipólmomentum.

### 3. Eredmények

Az irodalomban található munkák túlnyomó része a nem-rezonáns dinamikus Stark effektust (NRDSE) alkalmazza a Raman közelítésben. A kölcsönhatás következtében módosul a potenciálisenergia-felületek alakja, így az AC kereszteződésen áthaladó hullámcsomagok sebessége is, ami a Landau-Zener képlet szerint a fotofragmentumok elektronállapot szerinti arányának módosulásához vezet. A jelen munka alapvető különbsége, hogy a LiF molekula elektronállapotai dipólus-csatoltak, ami azt jelenti, hogy az elsőrendű DSE érvényes. Ennek következtében a kölcsönhatás a pillanatnyi elektromos teret követi. Emellett, a kontroll pulzus intenzitása viszonylag nagy, ami a potenciálisenergia-felületek jelentős torzulásához vezet. Ezt a 2. ábra szemlélteti, amelyen a (b) és (c) panelek a számolások során használt terahertzes lézer pulzus ((a) panel)



2. ábra. (a) A cikkben használt THz lézerpulsus alakja. Fénnyel indukált potenciálisenergia-felületek (LIPs) két különböző, az (a) panelen jelölt, időpillanatban: (b) zöld kör, (c) zöld háromszög.



3. ábra. Az elektronállapotok populációjának fejlődése  $\Delta t$  függvényében. Ferde lilá-vonalak jelzik az időpillanatokat, amikor a kontroll pulzus elektromos terének minimuma/maximuma van.

két időpillanatához tartozó fénnyel indukált potenciálisenergia-felületeit (light-induced potentials, LIPs) mutatja be. Ezeket a Hamilton operátor 1. képletében szereplő potenciálisenergia-mátrixnak (második tag) a diagonalizációjával kapjuk.

A dinamikus Stark hatást általában a pumpa és a kontroll pulzus közötti időeltolás függvényében vizsgálják. Mi is ezt a hagyományt követtük, és első lépésben a három elektronállapot populációjának időfejlődését vizsgáltuk a kontroll pulzus  $\Delta t$  késleltetésének függvényében. Számolásainkat véletlenszerű térbeli orientációjú molekulákra végeztük, amelyek kezdeti állapotát a  $\Sigma_1$  elektronállapot alap forgási  $J = 0$  és alap vibrációs  $\nu = 0$  sajátállapota képezte. A kapott eredményeket a 3. ábra mutatja be, ahol az időeltolás a kontroll pulzus periódusidejének ( $\tau_c = 111.77$  fs) egységeiben van kifejezve. Az ábra alapján nyilvánvaló, hogy a kontroll pulzusnak markáns hatása van ezekre a populációkra. A legszembetűnőbb jellemző a pumpa folyamat elnyomása, amikor a két pulzus időben fedi egymást. A gerjesztett populációk azonban nem csak lecsökkennek, hanem a terahertzes pulzus periódusát követő modulációkat mutatnak az időeltolás függvényében. Érdekes megjegyezni, hogy ezek a modulációk akkor is jelentkeznek, ha a Stark pulzus megelőzi a pumpát. A másik fontos jelenség a dinamika megkezdése után történő populációtranszfer a kontroll pulzus szélsőértékeinél, ami hatással van a  $\Sigma_1/\Pi_1$  csatornákon történő disszociáció

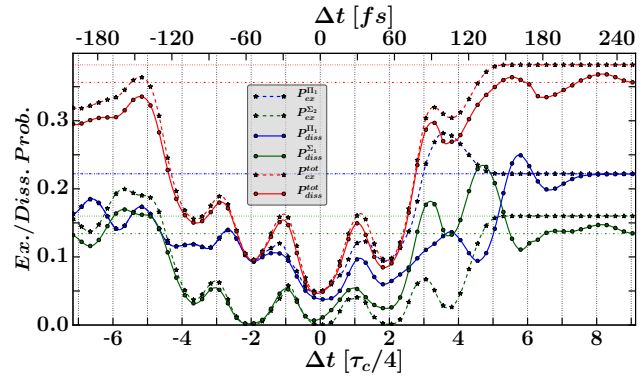
arányára.

A fenti észrevételeket áttekinthetőbb formában mutatja a 4. ábra. Szaggatott vonalak csillagokkal jelölik a gerjesztési-, míg folytonos vonalak körökkel a disszociációs valószínűséget. Zöld és kék szín jelzi a  $\Sigma_2$  illetve  $\Pi_1$  elektronállapotokra vonatkozó mennyiségeket, míg a piros színű vonalak ezek összegeit. Azonos színű kódú pontozott és szaggatott-pontozott vízszintes vonalak mutatják a rendszer gerjesztési és disszociációs valószínűségét a Stark pulzus hiányában. Látható, hogy megfelelően hosszú időeltolás esetén ( $\sim 5\tau_c/4$ ) a gerjesztett populációk a kontroll-mentes értékeikhez konvergálnak. Kiseb késleltetés esetében, amikor a kontroll megelőzi a pumpa pulzust a  $\Pi_1$ -re gerjesztett populáció alulmúlja, míg a  $\Sigma_2$  meghaladja a kontroll-mentes értékét. A közbeeső tartományban, amikor a két pulzus egyidejűleg van jelen, a gerjesztés lényegesen lecsökken, és csak rövid ideig jöhet létre a kontroll pulzus nulla-pontjai körül.

A rendszer viselkedésének oka, hogy a terahertzes sugárzás bár nem képes átmeneteket előidézni az elektronállapotok között, rotációs és vibrációs gerjesztéseket vált ki. Ennek következtében a  $\Sigma_1$  állapotban egy forgási hullámcsomag jön létre, ami a gerjesztett populációk modulációját okozza negatív  $\Delta t$  értékeknél, mivel a pumpa pulzus már nem az eredeti izotrop eloszlást találja. Továbbá, a hullámcsomag különböző komponenseinek kölcsönhatása egy interferenciamintázat megjelenéséhez vezet, ami a fotofragmentumok szögeloszlásában is megmutatkozik. Ezeket a szögeloszlásokat a 5. ábra bal oszlopa mutatja. Megfigyelhető, hogy abban az esetben ha a kontroll pulzus megelőzi a pumpát, a disszociáció főként a lézer polarizációs iránya mentén történik, és túlnyomórészt a  $\Sigma_1$  állapotban. Ez annak köszönhető, hogy a THz pulzus az eredetileg véletlenszerűen orientált molekulákat a saját polarizációs irányába rendezi.

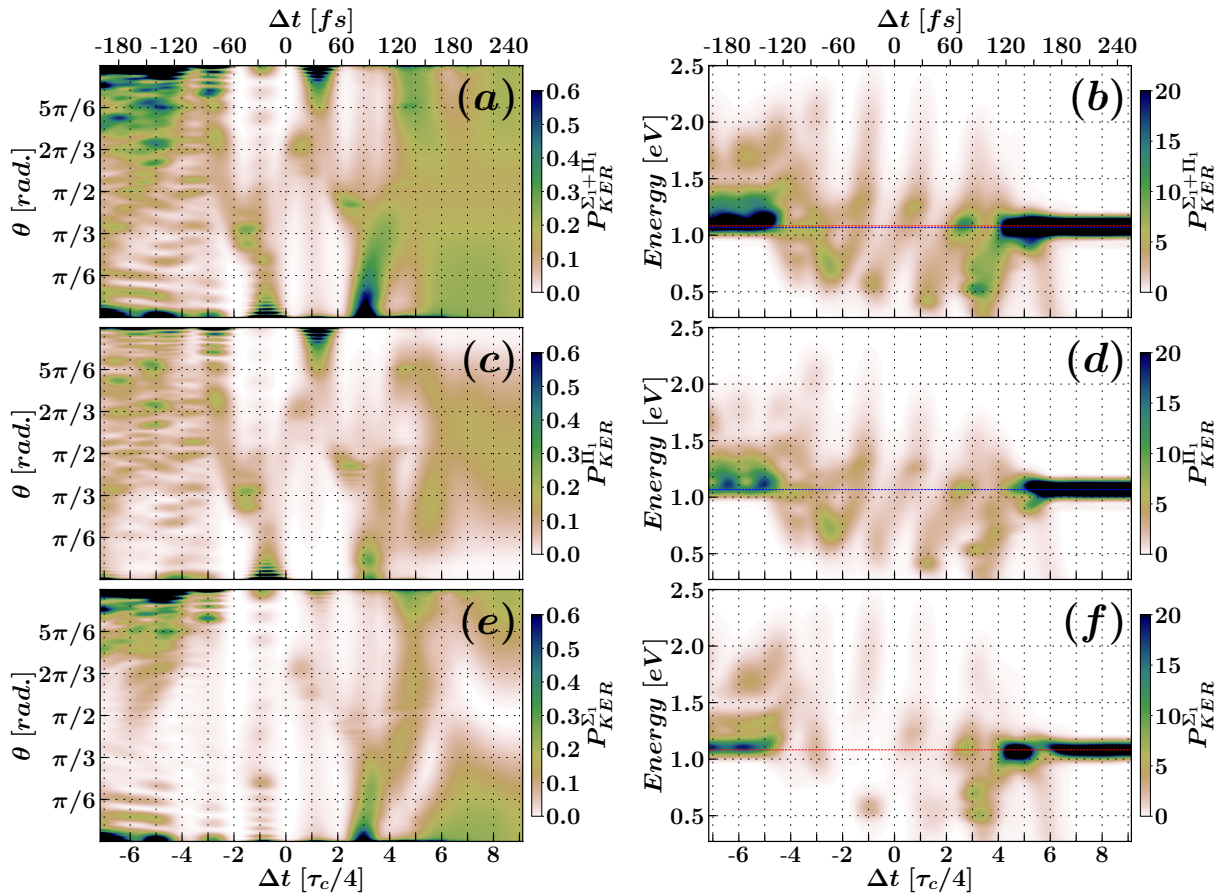
A két pulzus időbeli átfedése alatt tapasztalt pumpálási hatékonyság csökkenés a fényvel indukált potenciálisenergia-felületek segítségével érthető meg. Amint azt láttuk, a terahertzes pulzus a rendszer forgási gerjesztését idézi elő. A LIPs képen ez a potenciálisenergia-felületek  $\theta$  koordináta menti deformációjában nyilvánul meg: adott magtávolságon a  $\mu_i \cos(\theta) E(t)$  kölcsönhatási tag által a felületek megemelkednek vagy lesüllyednek a térmentes helyzetükhöz képest, azaz a  $\theta = \{0, \pi\}$  irányokba periodikusan potenciálgödrök jönnek létre. Emiatt az izotrop kezdeti eloszlás ezekbe a potenciálgödrökbe koncentrálódik. A másik fontos tényező, hogy a gerjesztett állapotok állandó dipólusmomentumai ellenkező előjelűek a Franck-Condon régióban mint az alapállapoté, így ellenkező irányba mozdulnak el. Ennek következtében amikor az alapállapotú hullámcsomag a lézerrel keltett potenciálgödörben összpontosul, az elektronállapotok közötti energiakülönbség meghaladja a pumpa pulzus energiáját, és a populáció transzfer nem jön létre. Erre az átvitelre csak rövid ideig van lehetőség a kontroll tér nullpontjai körül.

A  $\Pi_1$  állapot viselkedése különösen érdekes. A pumpa energia a  $\Sigma_1$ - $\Sigma_2$  átmenetre volt hangolva, így a  $\Sigma_1$ - $\Pi_1$  rezonanciafeltétel a  $\theta$  koordináta mentén változik a felületek kontroll pulzus által előidézett lengése során. Ez megfigyelhető a fragmentumok szögeloszlásában is a  $\Delta t \in [-3\tau_c, 5\tau_c]$  intervallumban. A  $\Pi_1$  állapothoz tartozó átmeneti dipólusmomentumok merőlegesek a molekulatengelyre, így a csatolás a felületek azon részén a legerősebb, ahol a kontroll tér általi torzítás a leggyengébb. Mivel a  $\Pi_1$  állapot alacsonyabban fekszik mint a  $\Sigma_2$ , a rezonanciafeltétel a kontroll pulzus előjelváltása előtt teljesül, amikor az alapállapotú hullámfüggvény még a lézer polarizációs irányába összpontosul. Emiatt a populáció átvitel is itt történik a gyengébb csatolás ellenére is. Ráadásul, a tér előjelváltása



4. ábra. Kék és zöld szaggatott vonalak jelzik a  $\Pi_1$  és  $\Sigma_2$  elektronállapotokra gerjesztett populációt, míg a kék és zöld folytonos vonalak a  $\Pi_1$  és  $\Sigma_1$  állapotokon történő disszociáció valószínűségét. A piros vonalak a gerjesztett és disszociáló populációk összegét jelölik.





5. ábra. Disszociáló fragmentumok szögeloszlása és kinetikus energia eloszlása: (c), (d)  $\Pi_1$  állapot; (e), (f)  $\Sigma_1$  állapot; (a), (b) a két disszociációs csatorna összege.

után a gerjesztett állapotokon alakulnak ki potenciálgödrök, ami a  $\Pi_1$  állapotra került hullámcsomagot a  $\theta = \{0, \pi\}$  irányba forgatja, előidézve ezzel a szögeloszlásban látható interferenciamintázatot. Ha a kontroll pulzust a rendszer gerjesztése után alkalmazzuk, de mielőtt a hullámcsomagok elérnék az AC kereszteződést, a fentebb említett populáció transzfer nyomait látjuk a szögeloszlásokban: a polarizációs irányra merőleges fragmentumok jelennek meg a  $\Sigma_1$  csatornán, míg a disszociációs valószínűség lecsökken a  $\Pi_1$  állapotban. Nagyobb időeltolások esetén a szögeloszlások a kontroll-mentes értékeikhez konvergálnak.

A kontroll pulzus hatását a szögeloszlások mellett a disszociáló fragmentumok kinetikus energiájának spektrumában is megtaláljuk. Ezeket az 5. ábra jobb oszlopa mutatja be. A piros és kék vízszintes vonalak a  $\Sigma_1$  és  $\Pi_1$  állapotokhoz tartozó spektrumok kontroll-mentes esetben számolt csúcserőértékét jelölik. Negatív időeltolások esetén ezeknél magasabb energiákat is találunk, ami a molekula rotációs-vibrációs gerjesztésére utal. Ha a kontroll pulzus jelen van a rendszer gerjesztése és a hullámcsomagok AC-n való áthaladása között, a spektrumok szétkenődnek. Ennek két oka van.

Először is, az energia-felületeknek a Stark hatás miatti lengése a fragmentumok potenciális energiájának módosulását okozza, ami végül a kinetikusenergia spektrumban nyilvánul meg. Ennek a változásnak a mértéke függ a kontroll pulzus fázisától, és attól, hogy a gerjesztett felület melyik tartományra került populáció.

A másik szintén a PES dinamikus változásának következménye. Korábbi munkák [11] rámutattak, hogy a Stark hatás következtében eltorzult energiafelületek a  $\Sigma_1$  és  $\Sigma_2$  állapotok közti nemadiabatikus csatolás helyének időfüggését is eredményezik. Ezt a 2. ábra is illusztrálja, ahol az  $R$ - $\theta$  síkban lévő fekete vonalak a AC kereszteződés helyét jelöli kontroll-mentes esetben, míg a piros görbék a fényel indukált felületek kereszteződéseit mutatják adott időpillanatokban. Háromállapotú leírásunkban a  $\Sigma_1$  és  $\Pi_1$  állapotok között is kialakul egy kereszteződés, amit a másikkal viszonyított közelsége miatt

az ábrán nem tüntettünk fel. Amikor ezek a kereszteződések kisebb magtávolságok felé mozdulnak, a disszociáló hullámcsomag újtába kerülnek, és populációtranszfer történik. Ez úgy is tekinthető, mintha a hullámcsomag egy potenciálgáttal találkozna, aminek következtében veszít a kinetikus energiájából. Ennek a folyamatnak a nyoma a 4. ábrán bemutatott elektronállapot populációkban a legszembetűnőbb. Miután a kereszteződések mozgásának iránya megváltozik, ismét populációátvitelre kerül sor. Mivel a gerjesztett állapotok közül a  $\Sigma_2$  fekszik magasabban, és ennek a  $\mu_{\Sigma_1\Sigma_2}$  átmeneti dipólmomentuma erősebb mint  $\mu_{\Sigma_1\Pi_1}$ , így az előzőleg a  $\Sigma_1$  állapotra került hullámcsomag jelentős része a  $\Sigma_2$ -re jut. Ennélfogva, a kontroll pulzus egyirányúan módosítja a két disszociációs csatorna arányát, a  $\Sigma_1$ -et részesítve előnyben.

## 4. Összefoglalás

Ebben a munkában egy terahertzes pulzus lítium-fluorid molekula fotodisszociációjára gyakorolt hatását vizsgáltuk. A bemutatott eredmények alapján a legfontosabb következmény a magasabb elektronállapotok gerjesztési hatékonyságának csökkenése. Ennek oka, hogy a kontroll pulzus hatására módosult potenciálisenergia-felületeket a pumpa pulzus már nem képes rezonánsan csatolni. Ez szakaszos pumpáláshoz vezet a kontroll tér nullpontjai körül. A felületek Stark fluktuációja a molekulák térbeli orientációjához, illetve a felületek közti dinamikusan változó kereszteződésekhez vezet. A disszociáló hullámcsomag ez utóbbiakkal való találkozása populációtranszfert eredményez, ami képes jelentősen módosítani a  $\Sigma_1/\Pi_1$  fragmentációs csatornák valószínűségi arányát.

## Köszönetnyilvánítás

A kutatást az EFOP-3.6.2-16-2017-00005 azonosítójú, EU társfinanszírozású projekt támogatta. Az ELI-ALPS projekt (GINOP-2.3.6-15.-2015-00001) az Európai Unió támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósul meg.

## Irodalom

- [1] P. W. Brumer és M. Shapiro, Principles of the Quantum Control of Molecular Processes (John Wiley & Sons, 2003)
- [2] G. A. Worth és G. W. Richings, Annu. Rep. Prog. Chem. Sect. C: Phys. Chem. **109**, 113 (2013)  
<https://doi.org/10.1039/C3PC90003G>
- [3] B. J. Sussman, D. Townsed, M. Y. Ivanov, és A. Stolow, Science **314**, 278 (2006)  
<https://doi.org/10.1126/science.1132289>
- [4] D. Townsed, B. J. Sussman, és A. Stolow, J. Phys. Chem. A **115**, 357 (2011)  
<https://doi.org/10.1021/jp109095d>
- [5] S. Fleischer, Y. Zhou, R. W. Field, és K. A. Nelson, Phys. Rev. Lett. **107**, 163603 (2011)  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.163603>
- [6] R. Damari, D. Rosenberg, és S. Fleischer, Phys. Rev. Lett. **119**, 033002 (2017)  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.119.033002>
- [7] Y. Kurosaki, H. Akagi, és K. Yokoyama, Phys. Rev. A **90** 043407 (2014)  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.90.043407>

- [8] N. Došlic, *J. Phys. Chem. A* **110**, 12400 (2006)  
<https://doi.org/10.1021/jp064363i>
- [9] A. Tóth, A. Csehi, G. J. Halász, és Á. Vibók, *Phys. Rev. A* **99** 043424 (2019)  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.99.043424>
- [10] A. Hofmann és R. de Vivie-Riedle, *Chem. Phys. Lett.* **346** 299 (2001)  
[https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(01\)00922-8](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(01)00922-8)
- [11] S. Scheit, Y. Arasaki, és K. Takatsuka, *J. Chem. Phys.* **140** 244115 (2014)  
<https://doi.org/10.1063/1.4884784>