

# 光强、频率对强激光场中的多原子分子 离子增强电离行为的影响

郑丽萍 邱锡钧

(上海大学理学院物理系, 上海 201800)

(2000 年 1 月 30 日收到, 2000 年 5 月 20 日收到修改稿)

通过利用短时指数传播子的对称分割和快速傅里叶变换, 数值求解一维含时薛定谔方程, 研究了一维多原子分子离子在超强脉冲强激光场中的增强电离(EI)行为, 给出了激光强度和频率对增强电离的影响. 计算表明随着激光频率的增加, 增强电离的临界键长变小, 电离概率也减小. 随着激光强度的增加, 电离概率增加, 当强度增加到一定值时, 就不再出现增强电离现象.

关键词: 强激光场, 分子离子, 增强电离

PACC: 4250

## 1 引 言

由于超短脉冲啁啾放大(CPA)技术的应用, 使激光强度有了迅速提高, 经聚焦后可达  $10^{20}$  W/cm<sup>2</sup>[1]. 当激光脉冲强度大于  $3.5 \times 10^{16}$  W/cm<sup>2</sup>, 其产生的电场与氢原子中基态电子所受的库仑场相当, 这时处理弱场的微扰理论已不再适用, 激光与物质的相互作用进入了非微扰相互作用范畴, 需要通过数值求解含时的薛定谔方程来研究其动力学特性.

由于激光技术的飞速发展, 强场分子动力学行为已成为强场物理学研究的热点. 分子在强场中的光电离行为一直是强场物理学研究的重要内容[2,3]. 1995 年 Bandrack 和 Corkun 发现了“电荷谐振增强电离效应”, 表明了强激光场中分子首先软化至临界键长  $R_c$ , 随后迅速电离. 剩下的正离子因库仑排斥而迅速分离(“库仑爆炸”行为)[4,5], 并分别从实验和理论上证明了分子增强电离(EI)的存在[6-8].

本文利用短时指数传播子对称分割和快速傅里叶变换等数学工具, 数值求解了一维含时薛定谔方程, 从而观察到了多原子分子离子的增强电离现象. 在此基础上, 研究了激光强度和频率、原子个数  $N$  对增强电离的影响.

## 2 理论模型与计算方法

对于一维多原子分子离子体系, 在线偏振光作用下, 采用一维模型. 首先讨论一维势的选取问题. 显然, 如果用  $V = -1/|x|$  来描述库仑场, 当  $x = 0$  时,  $V$  将出现奇异性. 选取软核模型[9,10]表述核间的排斥势, 这样即避免了真实库仑势存在的奇异性的问题, 也提供符合实际情况的势的形式. 其表达式为

$$V(R, x) = \sum_{n=(N-1)/2}^{(N-1)/2} \frac{-b}{\sqrt{a + (x + nR)^2}}, \quad (1)$$

其中,  $N$  为原子个数,  $R$  为相邻原子间的距离,  $a$  为软化势参数, 调整  $a$  可以使这一势场给出符合实际的基态能.  $b$  为势深参数, 用于改变势的深度. 调节  $a, b$  的值, 得到相应的模拟势. 计算中, 取  $a = b = 1$ .

在无外场作用下, 体系满足薛定谔方程(采用原子单位  $m_e = e = \hbar = 1$ , 记为 a. u.)

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(R, x)\right)\psi(x) = \epsilon\psi(x), \quad (2)$$

式中  $\epsilon$  为本征能量, 体系的初始波函数  $\psi_0$  可由方程计算出(2)式求解.

取激光场为  $E(t) = E_0 f(t) \cos \omega t$ , 式中  $E_0, \omega$  分别是光场的振幅和频率,  $f(t)$  为脉冲的包络因子, 与文献[7]相同的形式

$$f(t) = \begin{cases} \sin^2\left(\frac{\pi t}{2T_{on}}\right), & 0 \leq t \leq T_{on}, \\ 1, & T_{on} \leq t \leq T_c + T_{on}, \\ \cos^2\left(\frac{\pi(t - T_{on} - T_c)}{2T_{off}}\right), & T_c + T_{on} \leq t \leq T_{on} + T_c + T_{off}, \end{cases} \quad (3)$$

其中  $T_{on} = T_{off} = 2.5$  倍光波周期, 分别是激光波的上升和下降时间,  $T_c = 5$  倍光波周期, 是激光脉冲的常幅值.

在外加激光场作用下, 分子离子体系满足薛定谔方程

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left( -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(R, x) + xE(x) \right) \psi(x, t), \quad (4)$$

其解的形式为

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{i\Delta t \left( \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(R, x) + xE(t) \right)} \psi(x, t). \quad (5)$$

由于动能算符与势能算符不对易, 如按下式求解, 会引入  $(\Delta t)^2$  级误差

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{i\Delta t \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}} e^{-i\Delta t (V(x, t) + xE(t))} \cdot \psi(x, t) + O(\Delta t)^2, \quad (6)$$

采用短时指数传播子对称分割<sup>[11, 12]</sup>的方法, 将动能项分割为两项来求解的波函数, 可使误差降至  $(\Delta t)^3$  级, 此时

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{i\Delta t \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial x^2}} e^{i\Delta t (V(x, t) + xE(t))} \cdot e^{i\Delta t \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial x^2}} \cdot \psi(x, t) + O(\Delta t)^3. \quad (7)$$

理论上, 只要  $\Delta t$  足够小总可以得到很好的计算结果.

求解中, 由于动能传播子作用于动量空间, 势能传播子作用于坐标空间, 使用快速傅里叶变换 (FFT) 将坐标波函数变换动量表象, 这样指数动能算符作用在波函数上变成了相乘关系, 再经过逆 FFT 将动量波函数变换回坐标空间<sup>[13]</sup>. 在计算中, 将前半个  $\Delta t/2$  指数动能算符和后半个  $\Delta t/2$  指数动能算符组合成整个  $\Delta t$  上的动能算符, 大大缩短了运行时间. 利用无激光场中求出的波函数为初始波函数  $\psi_0$ , 由方程 (7) 可得到波函数随时间的演化过程.

为了使计算范围内的波函数归一化, 选取  $|x_{max}| = 409.6$  a. u., 空间步长  $\Delta x = 0.05$  a. u.. 这时  $N = 2|x_{max}|/\Delta x = 16384$ , 也满足 FFT 中  $N = 2^n$  的要求. 波函数的扩展空间为  $-|x_{max}| \leq x \leq |x_{max}|$ ,

$|widtx| = 400$  a. u. 它略小于  $|x_{max}|$ . 计算空间在  $|x| \leq 409.6$  a. u. 的范围内, 当波函数接近边界时, 为了避免波函数反射回计算空间而影响计算结果, 采用  $\cos^{1/8}$  作为模糊函数来吸收波函数, 由于这些被吸收的波函数已远离核, 因此可用来表示电子电离. 模糊函数的表达式取为

$$f(x) = \begin{cases} \cos^{1/8}(\pi(-widtx - x)) \chi_{x_{max}}(-widtx), & -x_{max} \leq x \leq -widtx, \\ 1, & -widtx < x < widtx, \\ \cos^{1/8}(\pi(x - widtx)) \chi_{x_{max}}(-widtx), & widtx \leq x \leq x_{max}, \end{cases} \quad (8)$$

其中,  $-|widtx| \leq x \leq |widtx|$  是光与分子的相互作用区, 在激光脉冲末计算电离概率.

### 3 计算结果与分析

图 1 给出了激光强度为  $1.5 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>, 频率为 780 nm,  $N = 7, 9, 11$  的多原子分子离子的电离概率与原子间间距  $R$  的关系. 我们观察到了相似的增强电离现象, 即电离概率在某个  $R$  处迅速增大, 并在一定的  $R$  范围内保持较大值后振荡减小, 可以认为在多原子分子离子中, 增强电离现象是其动力学特性之一. 从图中还观察到随着  $N$  的不同, 最大电离概率发生了改变, 临界键长  $R_c$  不同, 发生增强电离的  $R$  的范围也不同. 当  $N$  分别为 7, 9, 11 时, 电离概率峰值依次增大, 假设大于其电离概率峰值的 80% 发生增强电离, 则  $R$  的范围分别为 3.5—5.0, 3.2—5.9, 3.0—6.1 a. u.. 随着  $N$  的增大,  $R_c$

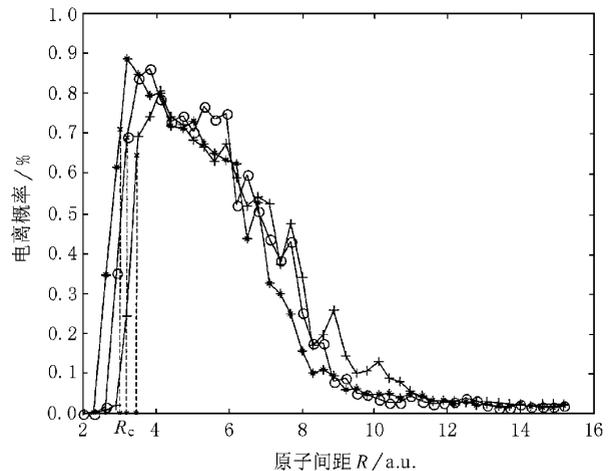


图 1  $N = 7, 9, 11$  电离概率与原子间距  $R$  的关系  
+  $N = 7$ ;  $\circ N = 9$ ;  $* N = 11$

(图中虚线处对应的  $R$ ) 向  $R$  减小的方向漂移, 发生增强电离的  $R$  的范围也增大.

图 2 是不同的多原子分子离子的电离能随原子间距  $R$  的变化规律. 由图可见电离能随  $N$  的增加而增大. 随着  $R$  增大, 相应的电离能减小, 三者的差距也变小, 当  $R = 15$  a. u. 时, 电离能几乎相同. 因此可以得出电离能并不是决定强场电离的主要因素.

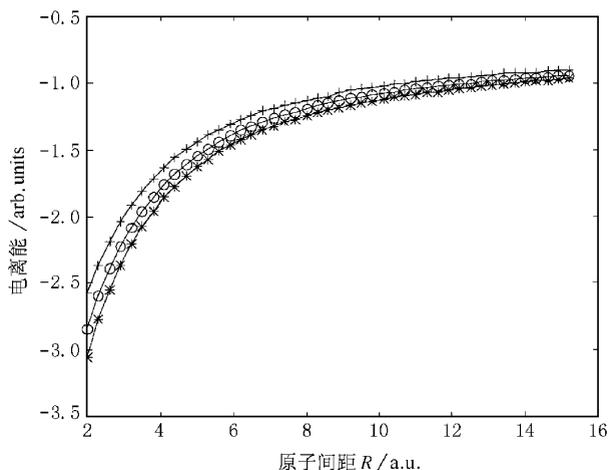


图 2  $N=7, 9, 11$  电离能与原子间距  $R$  的关系  
+  $N=7$ ; o  $N=9$ ; \*  $N=11$

图 3 是在不同光场强度下,  $N=9$  的分子离子电离概率和间距  $R$  的变化情况. 由图可知随激光强度的升高, 电离概率增大, 出现增强电离的  $R_c$  减小, 增强电离的键长的范围也越大. 当强度为  $2.0 \times 10^{15}$  W/cm<sup>2</sup> 时, 增强电离现象消失. 因此, 在中等强度 ( $10^{13}$ — $10^{15}$  W/cm<sup>2</sup>) 的激光作用下, 可以观察到

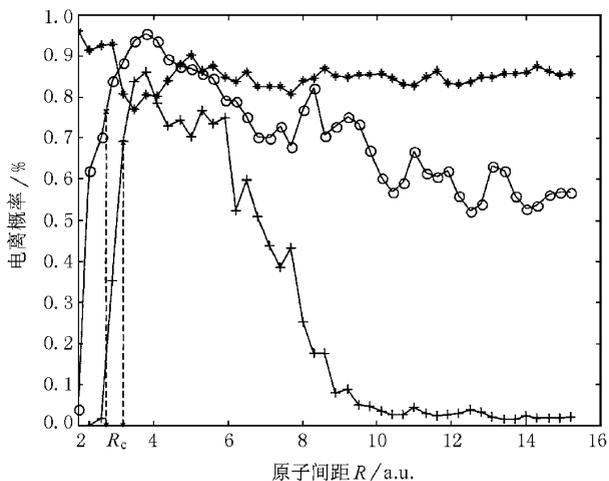


图 3 不同场强时, 电离概率与原子间距  $R$  的关系  
\*  $2.0 \times 10^{15}$  W/cm<sup>2</sup>; o  $6.0 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>; +  $1.5 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup>

增强电离现象. 我们认为出现增强电离是因为内部库仑场与外部激光场共同作用于多原子分子离子, 当激光场使电离发生后, 由于库仑场的存在, 会使电离概率显著增大, 从而出现增强电离现象. 此外, 在较弱场强中,  $R$  较大处的电离概率较小, 这也是由于库仑场在  $R$  较大时作用相对减弱, 对增强电离的贡献较小而导致电离概率也相应减小.

图 4 是不同的激光频率对增强电离的影响. 当激光强度保持  $1.5 \times 10^{14}$  W/cm<sup>2</sup> 不变, 对于  $N=9$  的分子离子, 频率分别取为 390 nm, 780 nm 和 1053 nm. 从图中可以看出随着频率的升高, 电离峰值概率减小, 临界键长  $R_c$  向小的方向漂移, 但总体上, 低频时电离行为变化不大, 高频激发时, 情况有较大的改变. 频率为 390 nm 时,  $R_c = 2.2$  a. u., 并且不再出现像低频下的增强电离峰, 电离概率迅速下降到较小值, 这是由于它已进入多光子电离的范围.

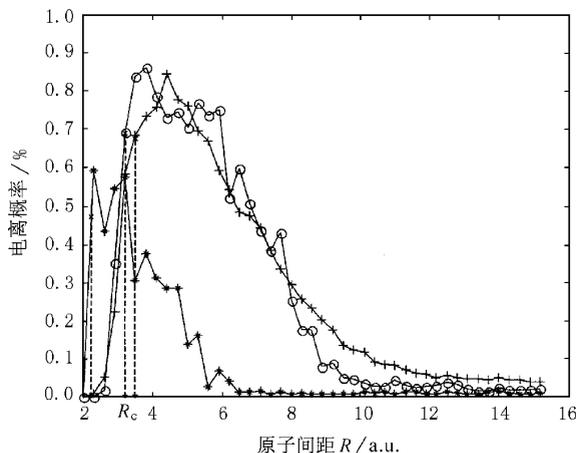


图 4 不同频率时电离概率与原子间距  $R$  的关系  
\* 390 nm; o 780 nm; + 1053 nm

总之, 最大电离概率和临界键长是增强电离中的两个重要参数. 从以上分析, 得出它们与激光场强与频率均有关系. 此外, 它们还与多原子分子离子中原子个数  $N$  有关. 对于  $H_2^+$  体系, 已有实验报道了这种增强电离特性<sup>[14, 15]</sup>, 我们相信, 随着实验技术的不断进步, 对多原子分子离子的实验将验证本文预测的结论.

## 4 总 结

本文研究了多原子分子离子在强激光场中的电离行为, 得出了增强电离现象是强场电离的特性之

一. 随着原子个数  $N$  的增大, 临界键长  $R_c$  向小的方向漂移. 讨论了激光强度和频率对增强电离的影响, 并对计算结果作了理论上的解释.

本课题得到中国科学院上海光学精密机械研究所强光开放实验室的支持. 作者衷心感谢徐志展院士, 李儒新研究员的关心和帮助.

- [ 1 ] P. Maine ,D. Strickland ,P. Bado *et al.* , *IEEE J. Quantum Electron* **24**( 1998 ) ,398.
- [ 2 ] A. D. Bandrack ,Molecules in laser Fields( Marcel Dekker ,New York ,1994 ) ,p. 156.
- [ 3 ] M. G. Baik ,M. Pont ,R. Shakeshaft ,*Phys. Rev.* ,**A54**( 1996 ) , 1570.
- [ 4 ] T. Zuo ,A. D. Bandrauk ,*Phys. Rev.* ,**A52**( 1995 ) ,R2511.
- [ 5 ] T. Seideman ,M. Ivanov ,P. B. Corkun ,*Phys. Rev. Lett.* ,**75** ( 1995 ) ,2819.

- [ 6 ] Su-xing Hu ,Wei-xing Qu ,Zhi-zhan Xu ,*Science in China( Series A )* **41**( 1998 ) ,198( in Chinese ) [ 胡素兴等 ,中国科学( A 辑 ) **41**( 1998 ) ,198 ] .
- [ 7 ] An-le Lei *et al.* ,*Chin. Phys. Lett.* **16**( 1999 ) ,264.
- [ 8 ] G. N. Gibson ,M. Li ,C. Guo *et al.* ,*Phys. Rev. Lett.* ,**79** ( 1997 ) ,2022.
- [ 9 ] J. H. Eberly ,Q. Su ,J. Javanainen ,*Phys. Rev. Lett.* ,**62**( 1998 ) , 881.
- [ 10 ] J. Javanainen ,J. H. Eberly ,Q. Su ,*Phys. Rev.* ,**A38**( 1988 ) , 3430.
- [ 11 ] M. D. Feit ,Jr. ,J. A. Fleck ,A. Steiger ,*J. Comput. Phys.* ,**47** ( 1982 ) ,412.
- [ 12 ] A. D. Bandrauk ,H. Shen ,*J. Chem. Phys.* ,**99**( 1993 ) ,1185.
- [ 13 ] R. W. Heather ,*Comput. Phys. Commun.* ,**63**( 1991 ) ,446.
- [ 14 ] L. J. Frasinski ,M. Stankiewicz ,P. A. Hatherly *et al.* ,*Phys. Rev.* ,**A46**( 1992 ) ,R6789.
- [ 15 ] M. Schmidt ,D. Normand ,C. Cornaggia ,*Phys. Rev.* ,**A50** ( 1994 ) ,5037.

## THE INFLUENCE OF THE INTENSITY AND THE FREQUENCY ON THE ENHANCED IONIZATION BEHAVIOR OF MULTIATOMIC MOLECULAR IONS IN THE INTENSE LASER FIELDS

ZHENG LI-PING QIU XI-JUN

( School of Science , Shanghai University , Shanghai 201800 , China )

( Received 30 January 2000 ; revised manuscript received 20 May 2000 )

### ABSTRACT

The enhanced ionization( EI ) behavior of multiatomic molecular ions is studied in intense laser fields by the numerical solution of time-dependent Schrodinger equation with the symmetrical splitting of the short-time exponential propagator and fast fourier transformation( FFT ). The influence of the intensity and the frequency of the laser on EI is given. With the laser frequency increasing ,the critical value of bond length for EI decreases and the ionization probability decreases too. The ionization probability increases with increasing laser intensity. The EI disappears when the intensity reaches a certain value.

**Keywords :** intense laser field , molecular ion , enhanced ionization

**PACC :** 4250