

相对相位对双色激光场中线性多原子分子离子 增强电离行为的影响

王训春 邱锡钧 郑丽萍

(上海大学理学院, 上海 200436)

(2001 年 5 月 16 日收到, 2001 年 6 月 12 日收到修改稿)

利用短时指数传播子的对称分割法, 数值求解了一维情况下的含时薛定谔方程, 研究了一维多原子分子离子在双色(基频 780 nm, 二倍频 390 nm)激光场中的增强电离行为, 给出了相对相位对不同核间距处的电离概率的影响. 计算结果表明, 在发生增强电离行为的核间距处, 相对相位对电离概率的影响最为显著. 用标准静场电离模型给出了合理解释.

关键词: 双色激光场, 相对相位, 增强电离

PACC: 4250

1 引 言

近几年来, 强激光与物质的相互作用已成为现代物理学中的一个极为活跃的领域. 分子或分子离子在强激光场中的动力学行为已引起了广泛的关注^[1,2]. 1995 年 Bandrauk 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)^[3,4], 并分别从实验和理论上证明了分子增强电离(EI)的存在^[5-7]. 研究表明, H_2^+ 和 H_3^{2+} 在双色激光场中也同样能够发生增强电离现象^[8]. 本文是采用短时指数传播子的对称分割法^[9,10]和快速傅里叶变换技术数值求解了一维含时薛定谔方程, 研究了双色激光场中线性多原子分子离子的增强电离行为.

2 理论模型与计算方法

对于线性多原子分子离子, 选取软核势模型^[11], 其一维势形式表示如下:

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

其中 N 为原子个数, R 为核间距, x 为电子坐标. 此时, 体系满足薛定谔方程(采用原子单位, $m_e = e = \hbar = 1$, 记为 a. u.)

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

其中 ϵ 为本征能量, 求解方程(2)得出的 $\psi(x)$ 作为体系的初始波函数.

假设外加激光场的线偏振方向与分子的轴方向平行, 激光场取如下形式:

$$E(t) = E(t) e = f(t) \{E_f \cos(\omega_f t) + E_h \cos(\omega_h t + \varphi)\} e, \quad (3)$$

其中 E_f, E_h 和 ω_f, ω_h 分别为基频和倍频光波的电场幅值和角频率, φ 为两激光场的相对相位, $f(t)$ 为脉冲的包络因子, 取为

$$f(t) = \begin{cases} \sin^2(\pi t/2T_{on}), & 0 \leq t \leq T_{on}; \\ 1, & T_{on} \leq t \leq T_c + T_{on}; \\ \cos^2(\pi(t - T_{on} - T_c)/2T_{off}), & T_c + T_{on} \leq t \leq T_{on} + T_c + T_{off}, \end{cases} \quad (4)$$

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

在外加激光场作用下, 体系的薛定谔方程为

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

其解的形式为

$$\psi(x, t + \Delta t)$$

$$= \exp\left(i\Delta t \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(R, x) - xE(t)\right)\right) \psi(x, t). \quad (6)$$

在求解(6)式中,使用短时指数传播子对称分割的方法可将误差降至 $(\Delta t)^2$ 量级^[9,10], Δt 为时间步长,此时

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \Delta t) = & \exp\left(i\Delta t \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \exp\left(-i\Delta t (V(R, x) + xE(t))\right) \\ & \cdot \exp\left(i\Delta t \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \psi(x, t) + O(\Delta t)^3. \end{aligned} \quad (7)$$

利用(2)式中求出的波函数为初始波函数 ψ_0 ,由方程(7)可得到波函数在激光场中随时间的演化过程.

由于动能传播子与势能传播子是不对易的,使用快速傅里叶变换,可将坐标波函数变换到动量表象,这样指数动能算符作用在波函数上变成了相乘关系,再经过逆快速傅里叶变换,将动量波函数变换回坐标空间^[12].

在计算中,为了确保波函数归一化,我们选取 $|x_{\max}| \leq 409.6$ a.u.为波函数的空间扩展区,计算空间就在此范围内.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这非物理波函数,由于这些波函数已远离核,因此可用来表示电子电离.模糊函数的表达式取为

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

其中取 $|widthx| = 400$ a.u.,略小于 $|x_{\max}|$, $-|widthx| \leq x \leq |widthx|$ 为光与分子离子的相互作用区,在激光脉冲末计算电离概率.

3 计算结果与讨论

本文计算了 $N=5$ 和 7 的线性多原子分子离子在双色激光场中的增强电离情况.双色激光场由波长为 780 nm的基频光波和其二倍频光波组成,基频激光的强度为 1.2×10^{14} W/cm²,二倍频激光的强度为 0.3×10^{14} W/cm².

图1(a)给出 $N=5$ 的线性多原子分子离子在相

对相位为 $0, \pi/2$ 和 π 时,电离概率与核间距 R 的关系.从图中可以看出,三种情况下都表现出了增强电离特性,并且发生增强电离处的核间距的范围也大致相同,在 $3.2\text{--}5.9$ a.u.之间.另外还可以看到,在发生增强电离行为的核间距范围内,相对相位对电离概率的影响十分明显,例如,在 $R=4.4$ a.u.处,相对相位为 $0, \pi/2$ 和 π 时的电离概率分别为 50.9% , 18.5% 和 55.1% .而当核间距再增大时,相对相位对电离概率的影响变得越来越小.

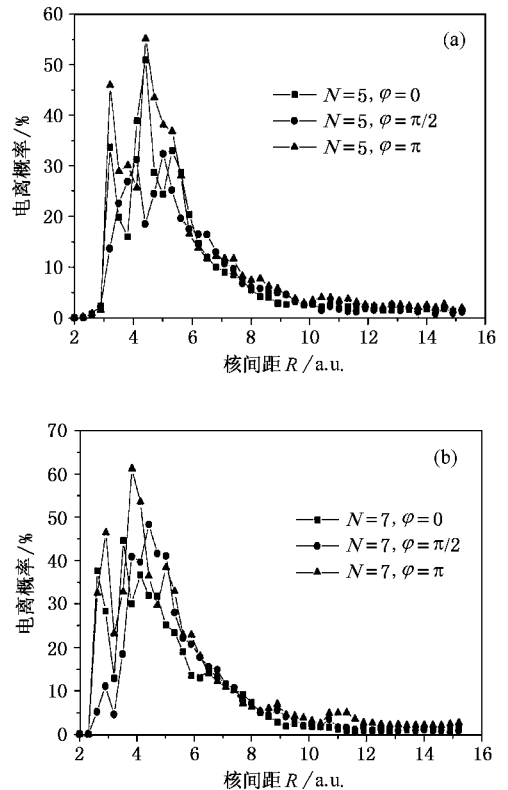


图1 不同相对相位时电离概率与原子间距 R 的关系

图1(b)给出 $N=7$ 的线性多原子分子离子在不同相对相位时的电离概率与 R 的变化关系.图中同样表明在不同的相对相位时都出现了增强电离现象,在不同的核间距范围内,电离概率受相对相位的影响程度也不一样,核间距在 $2.6\text{--}5.3$ a.u.范围时,相对相位对电离概率的影响大,当核间距大于 6.5 a.u.时,相对相位的影响变得很小.

相对相位对电离概率的影响可以用标准静场电离模型来解释.使用短时指数传播子对称分割法,让体系在峰值场作用下从自由场的基态波函数 $\psi_0(x)$ 开始演化,即

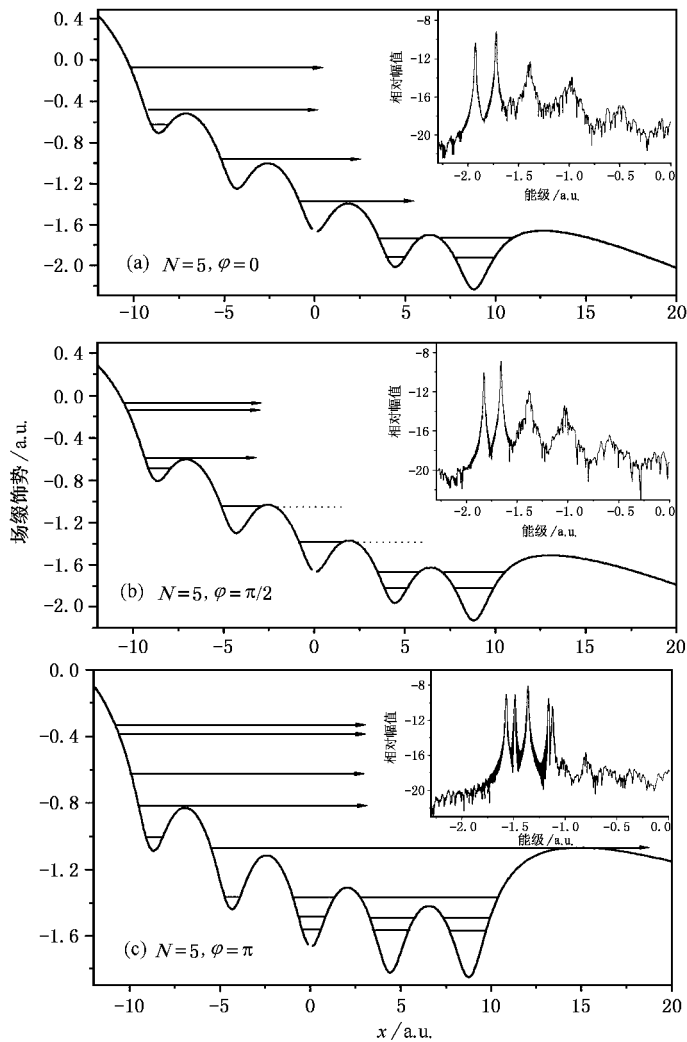


图2 $N=5$ 的线性多原子分子离子在 $\varphi=0$ $\pi/2$ 和 π 时的场缀饰势 E_{\max} 分别为 8.76×10^{-2} 7.59×10^{-2} 和 4.38×10^{-2} a.u., 实线为场诱导态能级的位置, 虚线为隧穿电离的可能性

$$\begin{aligned} \psi_0(x, t + \Delta t) = & \exp\left(i\Delta t \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \\ & \cdot \exp(-i\Delta t (V(R, x) + xE_{\max})) \\ & \cdot \exp\left(i\Delta t \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \psi_0(x, t), \end{aligned}$$

其中 E_{\max} 为双色激光场的最大强度. 然后计算归一化的自相关函数 $a(t) = \int \psi_0^*(x, t) \psi_0(x) dx$, $a(t)$ 经傅里叶变换后得到场诱导态^[5]. 这意味着经作用后基态波函数 $\psi_0(x, t)$ 可以用这些场诱导态展开, 而 $\psi_0(x, t)$ 与 $\psi_0(x)$ 的自相关度表明了展开的权重. 以 $N=5$ 的多原子分子离子为例, 计算了 $R=4.4$ a.u., 相对相位为 0 $\pi/2$ 和 π 时的场诱导态情

况, 相应诱导态能级的数值列于表1. 将场诱导态的能级叠加在场缀饰势 $V(R, x) - xE_{\max}$ 上, 之后得到图2, 图中右上角给出场诱导态的能级结构. 从图中可以看出, 在不同相对相位情况下, 场缀饰势的形状和场诱导态能级的相对位置也都不相同. 图2(b)与(a)和(c)相比, 它有更多的能级陷落在势阱中, 只有 $n=6, 7, 8$ 的能级摆脱了势阱的束缚(用箭头表示), 从而具有一定的电离概率, 但总的电离概率要小得多. 图2(c)与(a)相比, 虽然陷落在势阱中的能级多, 但是它的能级较浅(从表1可以看出), 结果总的电离概率较大. 由此可知, 在发生增强电离的核间距范围内, 由于不同相对相位的双色激光场对缀饰势形状和诱导态能级的影响程度不同, 导致了电离概率不同.

表 1 相对相位分别为 0 , $\pi/2$ 和 π 时的场诱导态能级 ($N=5, R=4.4$ a.u.)

场诱导态能级 $n/a.u.$	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=5$	$n=6$	$n=7$
$\varphi=0$	-1.9235	-1.7168	-1.3878	-0.9694	-0.6224	-0.5077	-0.4668
$\varphi=\pi/2$	-1.8235	-1.6551	-1.3765	-1.0306	-0.6728	-0.5867	-0.1520
$\varphi=\pi$	-1.5684	-1.4888	-1.3643	-1.1602	-1.1194	-1.0357	-0.7969

4 总 结

本文研究了线性多原子分子离子在双色激光场中的增强电离行为,发现在发生增强电离行为的核间距范围内,电离概率受相对相位影响较大,而其他

核间距处的电离概率随相对相位变化很小.利用标准静场电离模型给出了合理的解释.

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.作者衷心感谢徐至展院士、李儒新研究员的关心和帮助.

- [1] A. D. Bandrauk, *Molecules in Laser Fields* (Marcel Dekker, New York, 1994), p. 156.
- [2] A. Giusti-Suzor, X. He, O. Atabek *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **64** (1990), 515.
- [3] T. Zuo, A. D. Bandrauk, *Phys. Rev.*, **A52** (1995), R2511.
- [4] T. Seideman, M. Ivanov, P. B. Corkum, *Phys. Rev. Lett.*, **75** (1995), 2819.
- [5] S. X. Hu *et al.*, *Sci. China*, **A41**(1998), 198 [in Chinese] 胡素兴等, *中国科学*, **A41**(1998), 198].

- [6] A. L. Lei *et al.*, *Chin. Phys. Lett.*, **16**(1999), 264.
- [7] G. N. Gibson *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **79**(1997), 2022.
- [8] T. Zuo, A. D. Bandrauk, *Phys. Rev.*, **A54**(1996), 3254.
- [9] M. D. Feit, J. A. Fleck, A. Steiger, *J. Comput. Phys.*, **47**(1982), 412.
- [10] R. W. Heather, H. M. Frederick, *Phys. Rev.*, **A44**(1991), 7560.
- [11] J. Javanainen *et al.*, *Phys. Rev.*, **A38**(1988), 3430.
- [12] R. W. Heather, *Comput. Phys. Commun.*, **63**(1991), 446.

INFLUENCE OF RELATIVE PHASE ON THE ENHANCED IONIZATION BEHAVIOUR OF LINEAR MULTIATOMIC MOLECULAR IONS IN TWO-COLOR LASER FIELDS

WANG XUN-CHUN QIU XI-JUN ZHENG LI-PING

(School of Sciences, Shanghai University, Shanghai 200436, China)

(Received 16 May 2001; revised manuscript received 12 June 2001)

ABSTRACT

The enhanced ionization (EI) behaviour of linear multiatomic molecular ions is studied in two-color (fundamental radiation: 780 nm, the second harmonic 390 nm) laser fields by the numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation with the symmetrical splitting of the short-time exponential propagator. The influence of the relative phase between the two-color laser fields on the ionization probability is given. The numerical results demonstrate that the influence of the relative phase on the ionization probability is the strongest in the range of the inter-nuclear distance where the EI occurs. The influence can be explained in terms of the field-induced over-the-barrier ionization model.

Keywords: two-color laser fields, relative phase, enhanced ionization

PACC: 4250