

CO 分子在线性极化飞秒激光场中的 TDDFT 研究*

王志萍[†] 朱云 吴鑫 吴亚敏

(江南大学理学院, 无锡 214122)

(2013 年 7 月 30 日收到; 2013 年 9 月 10 日收到修改稿)

本文运用将含时密度泛函理论和分子动力学非绝热耦合的方法, 研究了 CO 分子在不同强度、不同极化方向的激光场中的电离和动力学行为. 研究发现, 激光强度越强, CO 分子吸收的能量越多, 电离越早且电离越强, CO 分子键长变长且伸缩振动越剧烈. 此外, CO 分子偶极矩的变化及峰值也随着激光强度的增强而增大. 对激光极化方向的研究发现, 激光极化方向沿着 CO 分子轴向时, 分子的电离最强且伸缩振动最剧烈. 当激光极化角增大时, CO 分子的电离逐渐被抑制且电子的偶极振动对激光极化方向表现出较强的依赖性. 此外研究还表明, CO 分子碳原子和氧原子周围电子的弥散方式不同且与激光极化方向有关.

关键词: 含时密度泛函理论, 分子动力学, 分子电离

PACS: 31.15.ee, 34.50.Gb, 34.80.Gs

DOI: 10.7498/aps.62.233102

1 引言

随着激光技术的发展, 原子和分子在强场中的动力学引起了人们的广泛关注. 原子和分子在强场作用下, 产生了许多有趣的物理过程, 例如阈上电离 (ATI)^[1-3]、非次序双电离^[4,5] 和高次谐波的产生 (HHG)^[6,7] 等. 分子不同于原子, 它比原子具有更多的自由度, 分子一些重要性质, 如分子的光电离和光离解^[8,9]、键软化^[10,11] 及分子在强激光场中的化学反应动力学^[12,13] 等过程都与它的取向和定向行为密切相关^[14]. 目前, 分子的取向和定向行为已成为一个极为活跃的研究领域. 此外, 对于分子的解离, 理论上人们通过采用不同的激光方案来研究相应的物理过程. CO 是自然界重要的介质, 参与了许多重要的物理、化学和生物过程. 在分子操控实验中, CO 分子具有很大优势. 它可以储存在高压瓶中, 使用方便; 其次它的能级结构较为简单, 可用于基于分子光谱技术的应用研究 (如精密测量)^[15]. 最近, 人们对 CO 在不同的激光场中的取向电离、解离过程等开展了相关的实验和理论研究^[16-18]. 比如, Liu 等^[19] 利用飞秒脉冲研究了 CO 的解离过

程, 黄云霞等^[20] 从理论上研究了复合静电场和非共振激光场对基态 CO 分子的取向.

从理论上说, 含时密度泛函理论 (time dependent density functional theory, TDDFT)^[21] 由于其严密的基础理论、明确的物理思想和广泛的适用范围而受到人们广泛关注. 它已发展成了用来处理多电子系统线性与非线性含时响应行为的一个标准工具. TDDFT-MD 模型^[22,23] 是一个描述复杂体系电子动力学与离子动力学耦合的模型. 本论文运用该模型系统地研究了一氧化碳 (CO) 分子在不同强度、不同极化方向的激光场中的电离和动力学行为.

2 理论方法

含时密度泛函理论 (TDDFT) 的主要物理思想就是在构造 N 个电子相互作用系统的运动方程时, 以空间和时间相关的密度 $n(\mathbf{r}, t)$ 为自变量. 使用原子单位 $m_e = e = \hbar = 1$, 根据 Kohn-Sham 定理^[24], 无相互作用的单粒子波函数 $\phi_j(\mathbf{r}, t)$ 满足含

* 国家自然科学基金 (批准号: 61178032)、中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: JUSRP11A21) 和江苏省高等教育学会“十一五”教育科学规划 (批准号: JS053) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: zpwang03247@163.com

时 Kohn-Sham(TDKS) 方程:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \phi_j(\mathbf{r}, t) = \hat{H}_{\text{KS}} \phi_j(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\nabla^2}{2} + V_{\text{eff}}[n(\mathbf{r}, t)] \right) \phi_j(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

其中, 系统的电子密度 $n(\mathbf{r}, t) = \sum_j \phi_j^*(\mathbf{r}, t) \phi_j(\mathbf{r}, t)$. 式中 V_{eff} 表示 Kohn-Sham 有效势, 它表示为

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{ion}}(\mathbf{r}, t) + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) + V_{\text{H}}[n(\mathbf{r}, t)] + V_{\text{xc}}[n(\mathbf{r}, t)]. \quad (2)$$

它由四个部分组成. $V_{\text{ion}}(\mathbf{r}, t)$ 为离子的背景势, 采用模守恒赝势. 在对多原子分子的计算中, 赝势的具体形式采用了 Goedecker 等^[25]的形式. $V_{\text{H}} = \int d^3 r' \frac{n(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$ 为电子的库仑势. 交换关联势 V_{xc} 是电子密度的唯一泛函, 这里采用了局域密度近似. 实际运用中, 采用 Perdew 的参数化形式^[26]. 此外, 为了考虑自洽相互作用修正, 本文采用了简单的平均密度自洽相互作用修正^[27]. $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t)$ 是外场势. 在本文中, 就是激光外场. 对于激光场, 在其强度低于 10^{18} W/cm^2 时, 激光的磁场分量与电场分量相比很小而可以忽略, 又由于激光的波长比分子线度大的多, 激光传播时在分子线度内的相移非常小, 忽略激光场传播时在分子线度内的相移, 也就是说对激光场采用电偶极矩近似^[28], 这样线性极化的激光场的电场部分可以用一个高频振荡电场描述,

$$E(t) = \hat{e} E_0 f(t) \cos(\omega t), \quad (3)$$

其中, E_0 正比于 \sqrt{I} , I 是激光强度, ω 是激光频率, $f(t)$ 是脉冲波包, \hat{e} 是极化方向. 本文采用 \cos^2 型脉冲波包, 激光脉冲的时间起点为所有的时间起点.

考虑离子的运动, 可以用分子动力学来描述. 离子所受的力包括来自电子的作用 (通过赝势来描

述的) 和其他离子的作用. 如果考虑外场, 还应包括外场的作用力. 对于第 i 个离子, 它的运动方程^[22] 可以表示为

$$\dot{\mathbf{P}}_i = -\nabla_{\mathbf{R}_i} E, \quad \dot{\mathbf{R}}_i = \nabla_{\mathbf{P}_i} E = \frac{\mathbf{P}_i}{M_i}, \quad (4)$$

其中, \mathbf{P} 表示离子的动量, M_i 表示第 i 个离子的质量, \mathbf{R}_i 表示第 i 个离子的坐标, E 是离子的能量.

激光诱导的电子偶极矩^[22] 可以表示为 $D(t) = \int m(\mathbf{r}, t) d^3 r$. 逃逸的电子数定义为^[22] $N_{\text{esc}} = N_{t=0} - \int_V d^3 r m(\mathbf{r}, t)$, 其中 $N_{t=0}$ 是初始时刻系统总的电子数, V 是数值计算空间的大小.

3 计算结果及讨论

CO 分子共有 2 个原子和 10 个共价电子 (其中碳原子考虑 4 个共价电子, 氧原子考虑 6 个共价电子). 在计算过程中, CO 分子放置于大小为 $26a_0 \times 26a_0 \times 26a_0$ 立方体计算盒子里, 其中碳原子和氧原子都处在 x 轴上. 立方体计算盒子被划分为 $64 \times 64 \times 64$ 个网格, 网格的间距为 $0.412a_0$. 计算采用了吸收边界条件. 在电子波函数和离子演化过程中采用相同的时间步长 $\Delta t = 0.0125 \text{ a.u.}$. 激光脉冲的半高全宽 (FWHM) 为 8 fs, 激光频率为实验室常用的 800 nm 的激光, 即 $\omega = 1.55 \text{ eV}$. 图 1 分别给出了 CO 分子结构示意图、激光极化方向示意图及 \cos^2 型激光脉冲波包的包络图, 其中 θ 角为激光极化方向与 x 轴之间 (即 CO 分子的轴向) 的夹角. 从 \cos^2 型激光脉冲波包的包络图可以看出激光脉冲在 16 fs 时被关闭, 在 8 fs 时达到最大值. 本文计算所得的基态 CO 分子的键长为 $2.03a_0$, 电离能为 13.82 eV, 与实验值 $2.13a_0$ 和 14.01 eV ^[29] 的相对误差分别为 4.7% 和 1.36%. 这表明 CO 分子的基态结构与实验值是比较符合的.

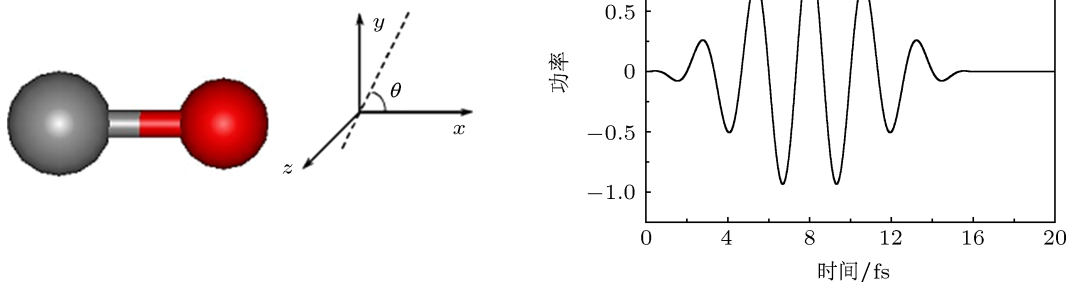


图 1 CO 分子结构图、激光极化方向示意图及 \cos^2 型激光脉冲波包的包络图

3.1 激光强度 I 的影响

为了考虑激光强度对 CO 分子激发的影响, 本文采用了三种强度的激光, 分别为 $I = 1 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$, $2 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 及 $1 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$. 激光的极化方向沿着 x 轴, 即沿着 CO 分子的轴向, $\theta = 0^\circ$. 由于强激光-原子作用过程准静态解释的本质参数是由激光强度和频率决定的. 在当前三种强度的激光参数下, CO 分子的有质动能 $U_p = eI/4m\omega^2$ 分别为 0.595 eV, 11.904 eV 和 59.52 eV, 其中 e, m 分别为电子的电量和质量. 本文计算所得的 CO 分子的电离能 I_p 为 13.82 eV, 则区分强场中遂穿电离和多光子电离过程的 Keldysh 参数 $\gamma = \sqrt{I_p/2U_p}$ 分别为 3.41, 0.762, 0.341. 因此, 对于 $I = 1 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ 情况, CO 的电离为多光子电离而另外两种激光强度下 CO 的电离属于遂穿电离. 图 2(a) 是不同激光强度下, CO 分子电离随时间演化图, 其中实线对应 $I = 1 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$, 虚线对应 $I = 2 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, 点线对应 $I = 1 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$. 为了跟踪分子的电子和离子在弛豫过程的行为, 实际计算在激光脉冲关闭后都进行至 30 fs. 此外, 图 2(a) 中的插图还给出了在 15 fs 时刻, 不同激光强度下 CO 分子电离随激光强度变化关系, 且插图的横纵坐标都采用对数坐标. 首先, 由图 2(a) 可以发现, 当 $t = 30 \text{ fs}$ 时, 三种激光强度下, CO 电离总数分别为 0.04, 0.35 和 1.41. 这表明 CO 分子的电离随着激光强度的增大而增强. 其次, 仔细观察图 2(a) 还可以发现, 当激光脉冲作用于 CO 分子时, 一开始并没有电子被电离. 随着激光作用时间的增加, 在 $I = 1 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$ 情况下, 最早有电子被电离, 这表明激光强度越大, 分子吸收的能量越多, 电离也越早. 在 5 fs 以后, 三种情况下, 分子的电离都迅速增加, 并在 12 fs 左右达到饱和 (即在激光脉冲关闭前已经到达饱和). 此外, 由图 2(a) 的插图可以看出, CO 分子的饱和电离值与激光强度几乎成一次线性关系, 但激光强度较低时 ($< 2 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$) 饱和和电离值随激光强度的增强而增加较快. 当激光强度较高时 ($> 2 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$), 饱和和电离值随激光强度的增强而缓慢增加. 图 2(b) 为 CO 分子沿激光极化方向偶极矩 D_x 随时间演化图. 由图 2(b) 可以看出, 在三种强度的激光脉冲作用下, CO 分子的偶极矩 D_x 随时间演化关系与图 1 中的激光脉冲包络都是很相似的, 即当激光达到峰值时, D_x 变化也达到峰值; 脉冲关闭后, D_x 也趋近于零. 这表明在这三种强度的激光作用下, 分子的激发还处于线性响应.

比较图 2(b) 中的三条曲线还可以发现, 激光强度越大, D_x 的变化及峰值也越大.

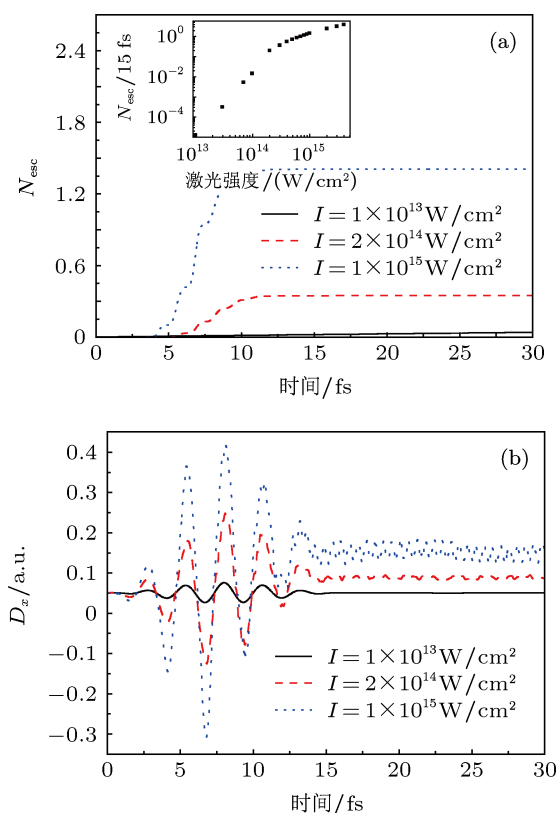


图 2 激光强度对 CO 分子电离和偶极矩的影响 (a) 不同激光强度下, CO 分子电离随时间演化图; (b) 不同激光强度下, CO 分子沿激光极化方向偶极矩随时间演化图

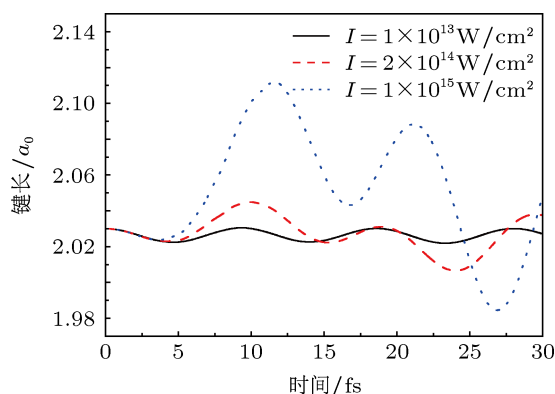


图 3 图 2 条件下, CO 分子键长随时间演化图

图 3 给出了在不同的激光强度下 CO 分子键长随时间演化图. 由图 3 可以看出 CO 在三种激光强度的激光场中都做伸缩振动, 但激光强度越大, CO 分子伸缩振动越剧烈. 此外, 比较图 3 中三条曲线的振幅, 不难发现激光强度越大, CO 分子的键长也越长. 这主要是由于激光强度越大, CO 分子的电离越强, 离子间的库仑相互作用导致 CO 分子键长变长.

3.2 激光极化方向的影响

为了研究激光极化方向对 CO 分子激发的影响, 这里主要考虑的是激光在 xy 平面内的极化方向. 图 4(a) 给出了六种极化方向下, CO 分子的电离随时间演化图. 激光的强度为 $I = 4 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, 频率为 1.55 eV , 在当前的激光参数下, CO 分子的有质动能 $U_p = eI/4m\omega^2$ 为 5.95 eV , Keldysh 参数 $\gamma = \sqrt{I_p/2U_p}$ 为 0.54 , 该值小于 1. 因此在当前的激光作用下, CO 分子的电离为逐穿电离. 由图 4 可以看出, CO 分子电离随时间演化的趋势与图 2(a) 是一致的. 但是不难发现, 在激光其他参数都相同的情况下, 当 $\theta = 0^\circ$ 时, CO 分子最终有 0.55 个电子被电离; 当 $\theta = 90^\circ$ 时, 最终有 0.46 个电子被电离. 这表明当激光极化方向沿着 CO 分子线轴向时, CO 分子的电离最强. 图 4(b) 为图 4(a) 条件下, 在 15 fs 时刻 CO 分子的总电离值与极化方向的关系图. 由图 4(b) 可以看出, 当 θ 角逐渐增大时, CO 分子的电离逐渐被抑制. 这与 Li 等^[16] 采用 MO-ADK 理论得到的 CO 分子电离与激光极化方向的关系是一致的. 图 5(a) 和 (b) 分别给出了三种极化方向情况下, CO 分子 x, y 方向的偶极矩 D_x, D_y 随时间演化图. 由 5(a) 可以看出, 当 $\theta = 0^\circ$ 时, D_x 随时间演化图与图 1 的激光脉冲包络很相似. 当 θ 增大时, D_x 的幅值减小. 而当 $\theta = 90^\circ$ 时, D_x 几乎为零. 相反的, 由图 5(b) 可以看出, 当 $\theta = 0^\circ$ 时, D_y 几乎为零, 当 $\theta = 90^\circ$ 时, D_y 随时间演化图与图 1 中的激光脉冲包络很相似. 因此, 结合图 5(a) 和 (b) 可以得出, x 方向的激光脉冲仅能激发起 CO 分子 x 方向的偶极振荡, y 方向的激光脉冲仅能激发起 y 方向的偶极振荡. 当激光极化方向与 CO 分子轴向成 45° 时, 即 $\theta = 45^\circ$ 时, 激光脉冲能够激发起 CO 分子在 x 和 y 方向的偶极振荡, 而且从坐标标度可以发现 x 方向的偶极振荡强于 y 方向的偶极振荡.

图 6 给出了在图 5 条件下 CO 分子键长随时间演化图. 由图 6 可以看出三种条件下, CO 分子都作伸缩振动, 而且振动趋势大致相同. 但是比较三条曲线可以发现, 当 $\theta = 0^\circ$ 时, CO 分子伸缩振动相对另外两种情况要剧烈些. 这是由于当激光极化方向沿 CO 分子轴向时 CO 分子电离最强导致库仑相互作用增强导致的.

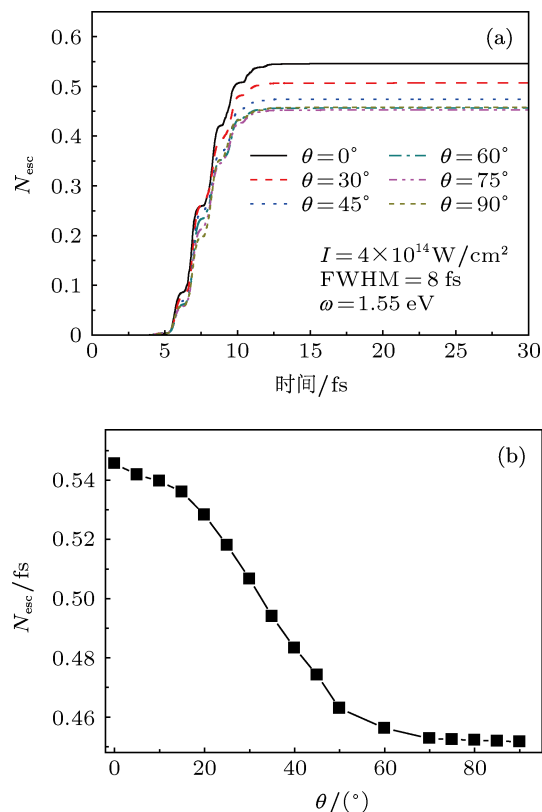


图 4 (a) 激光极化方向在 xy 平面内且与 x 轴成不同角度 θ 时, CO 分子电离随时间演化图; (b) 15 fs 时刻, CO 分子的总电离值与极化方向的关系图

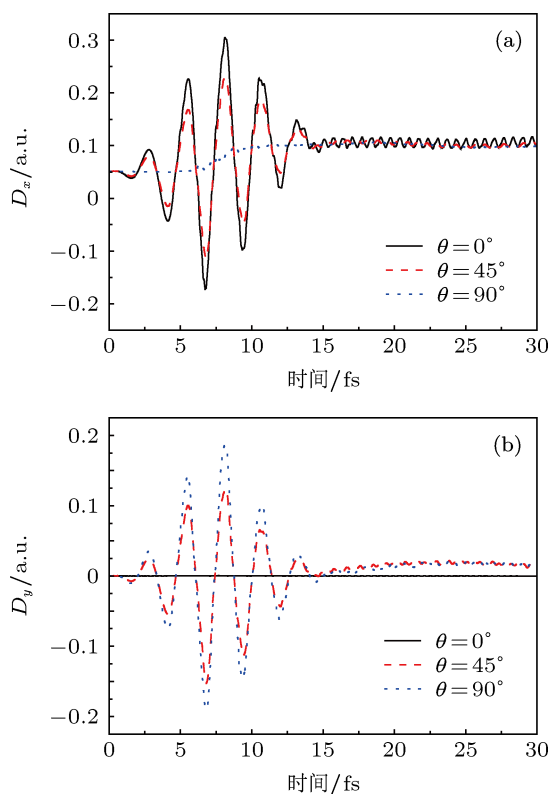


图 5 三种激光极化方向对 CO 分子偶极矩的影响 (其他激光参数与图 4 相同) (a) CO 分子 x 方向偶极矩随时间演化图; (b) CO 分子 y 方向偶极矩随时间演化图

电子局域化函数 (ELF) 能够用来描述分子和固体中化学键的形成 [30,31]. 最近, Burnus 等 [32] 发展了时间相关的电子局域化函数用来分析化学键的成键与断裂. 图 7 形象地给出了在三种不同的激光极化方向情况下, CO 分子在电离达到饱和时 (即 13 fs 时) 其在 xy 平面的电子密度分布相对其基态电子密度分布的变化的等高线图及原子结构示意图. 黑实点和红实点分别表示碳原子和氧原子. 其中, 图 7 左上角的子图为 CO 分子在 xy 平面内的基态电子密度分布等高线图. 其余子图按顺时针排序为激光极化角增大的方向. 首先, 由图 7 左上角子图可以看出, CO 分子处于基态时电子集中分布在原子的周围, 这表明电子与原子耦合的很好而且计算空间是足够大的. 其次, 顺时针观察图 7 中每个子图, 可以发现 CO 分子在不同极化方向的激光场中其电子弥散在整个计算空间, 但激光极化角 θ 不同, 电子弥散的程度和方式也不同. 对于 $\theta = 0^\circ$, 碳和氧的共价电子主要沿 x 轴方向弥散. 当 $\theta = 45^\circ$

和 $\theta = 90^\circ$ 情况时, 碳周围电子主要还是沿 x 轴方向弥散但氧周围主要沿 y 轴弥散. 但是比较后两种情况, 也可以发现, $\theta = 45^\circ$ 时电子弥散的更开, 这与该情况下 CO 分子的电离大是相符合. 因此, 从图 7 可以得出 CO 分子在不同极化方向的激光场中, 碳原子周围电子弥散主要沿分子轴向, 但氧原子周围电子的弥散方式受极化方向影响较大.

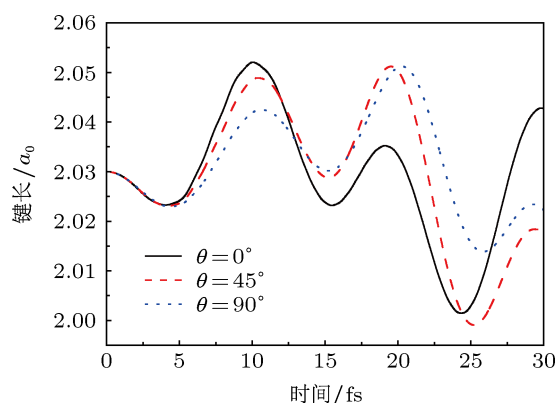


图 6 在图 5 条件下 CO 分子键长随时间演化图

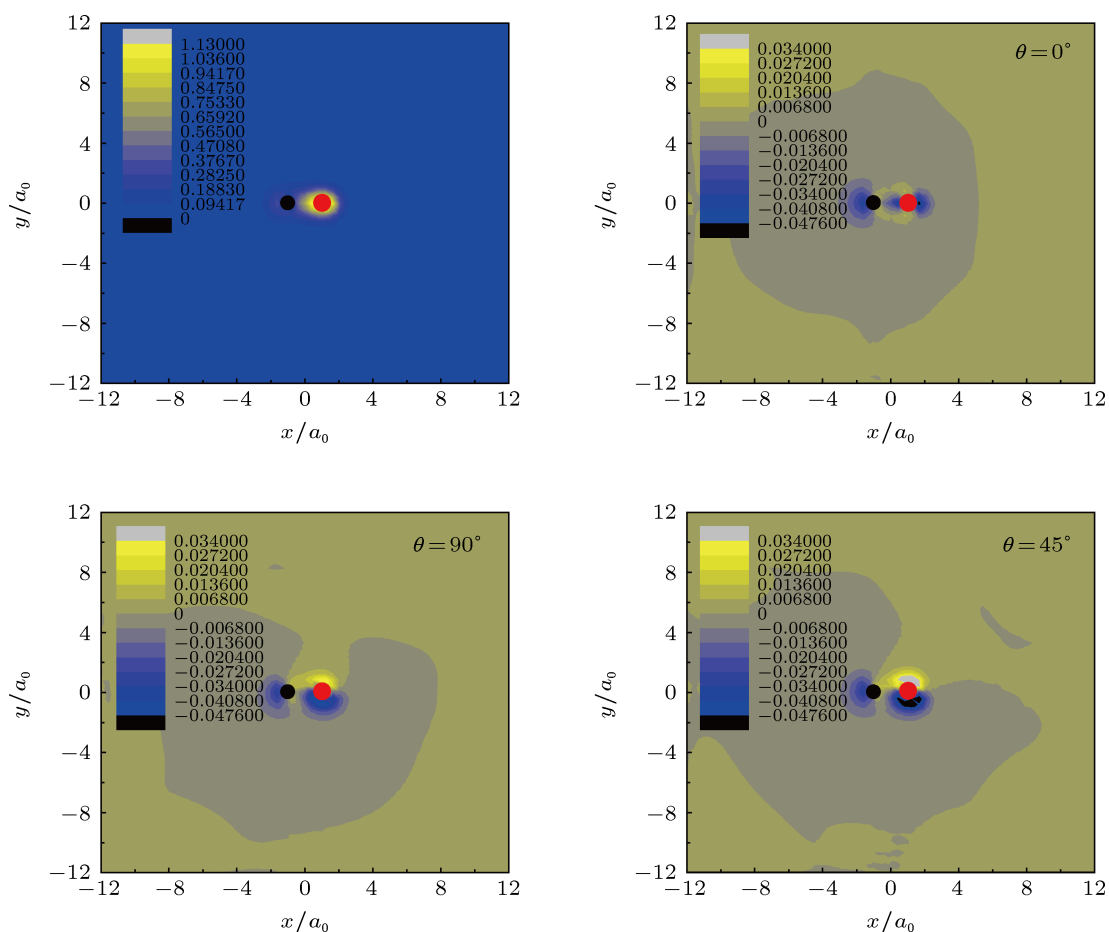


图 7 CO 分子在 xy 平面内基态电子密度及在图 5 条件下 CO 分子在电离达到饱和时其在 xy 平面的电子密度分布相对其基态电子密度分布的变化的等高线图及原子结构示意图

4 结 论

本文采用将含时密度泛函理论和分子动力学非绝热耦合的方法,研究了 CO 分子在不同强度、不同极化方向的激光场中的电离和动力学行为. 计算结果表明,激光强度越强,CO 分子吸收的能量越多,电离越早发生且电离值也越大,CO 分子键长变长且伸缩振动越剧烈. 此外,CO 分子偶极矩的变化

及峰值也随着激光强度的增强而增大. 对激光极化方向的研究表明,当激光极化方向沿着 CO 分子轴向时,分子电离最强且伸缩振动最剧烈. 当极化角逐渐增大时,CO 分子的电离逐渐被抑制且电子的偶极振动对激光极化方向表现出较强的依赖性. 此外研究还表明,CO 分子碳原子周围电子弥散主要沿分子轴向,但氧原子周围电子的弥散方式受极化方向影响较大.

- [1] Liao Q, Lu P X, Lan P F, Cao W, Li Y H 2008 *Phys. Rev. A* **77** 013408
- [2] Paulus G G, Lindner F, Walther H, Baltuska A, Goulielmakis E, Lezius M, Krausz F 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 253004
- [3] Fu Y Z, Zhao S F, Zhou X X 2012 *China. Phys. B* **21** 113101
- [4] Zhou Y M, Liao Q, Zhang Q B, Hong W Y, Lu P Y 2010 *Opt. Express* **18** 632
- [5] Saugout S, Cornaggia C 2006 *Phys. Rev. A* **73** 041406
- [6] Lan P F, Lu P X, Li F, Li Y H, Yang Z Y 2008 *Opt. Express* **16** 5868
- [7] Itatani J, Levesque J, Zeidler D, Niikura H, Pepin H, Kieffer J C, Corkum P B, Villeneuve D M 2004 *Nature* **432** 867
- [8] Litvinyuk I V, Lee K F, Dooley P W, Rayner D M, Villeneuve D M, Corkum P B 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 233003
- [9] Seideman T 1995 *J. Chem. Phys.* **103** 887
- [10] Bucksbaum P H, Zavriyev A, Muller H G, Schumacher D W 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 1883
- [11] Natan A, Lev U, Prabhudesai V S, Bruner B D, Strasser D, Schwalm D, Ben-Itzhak I, Heber O, Zafman D, Silberberg Y 2012 *Phys. Rev. A* **86** 043418
- [12] Stapelfeldt H, Seideman T 2003 *Rev. Mod. Phys.* **75** 543
- [13] Itatani J, Levesque J, Zeidler D, Niikura H, Pépin H, Kieffer J C, Corkum P B, Villeneuve D M 2004 *Nature* **432** 867
- [14] Jia X Y, Fan D H, Li W D, Chen J 2013 *China. Phys. B* **22** 013303
- [15] Blokland J H, Riedel J, Putzke S 2011 *J. Chem. Phys.* **135** 114201
- [16] De S, Znakovskaya I, Ray D, Anis F, Johnson N G, Bocharova I A, Magrakvelidze M, Esry B D, Cocke C L, Litvinyuk I V, Kling M F 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 153002
- [17] Li H, Ray D, De S, Znakovskaya I, Cao W, Laurent G, Wang Z, Kling M F, Le A T, Cocke C L 2011 *Phys. Rev. A* **84** 043429
- [18] Wu J, Schmidt L P H, Kunitski M, Meckel M, Voss S, Sann H, Kim H, Jahnke T, Czasch A, Dörner R 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 183001
- [19] Liu Y Q, Liu X R, D Y K, Wu C Y, Jiang H B, Gong Q H 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 073004
- [20] Huang Y X, Xu S W, Yang X H 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 243701 (in Chinese) [黄云霞, 徐淑武, 杨晓华 2012 物理学报 **61** 243701]
- [21] Gross E K U, Kohn W 1990 *Adv. Quant. Chem.* **21** 255
- [22] Calvayrac F, Reinhard P G, Suraud E, Ullrich C A 2000 *Phys. Rep.* **337** 493
- [23] Fennel T, Meiwes-Broer K H, Tiggesbäumker J, Reinhard P G, Dinh P M, Suraud E 2003 *Rev. Mod. Phys.* **82** 1793
- [24] Kohn W, Sham L J 1965 *Phys. Rev.* **140** A1133
- [25] Goedecker S, Teter M, Hutter J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 1703
- [26] Perdew J P, Wang Y 1992 *Phys. Rev. B* **45** 13244
- [27] Legrand C, Suraud E, Reinhard P G 2002 *J. Phys. B* **35** 1115
- [28] Faisal F H M 1987 *Theory of Multiphoton Processes* (New York: Plenum)
- [29] <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
- [30] Becke A D, Edgecombe K E 1990 *J. Chem. Phys.* **92** 5397
- [31] Bilalbegović G 2008 *Eur. Phys. J. D* **49** 43
- [32] Burnus T, Marques M A L, Gross E K U 2005 *Phys. Rev. A* **71** 010501(R)

TDDFT studies on CO in a linear polarized femtosecond laser field*

Wang Zhi-Ping[†] Zhu Yun Wu Xin Wu Ya-Min

(School of Science, JiangNan University, Wuxi 214122, China)

(Received 30 July 2013; revised manuscript received 10 September 2013)

Abstract

We present a theoretical study on the ionization and excitation dynamics of CO in various linear-polarized laser fields with in the frame work of the time-dependent density functional theory (TDDFT), applied to valence electrons, coupled non-adiabatically with molecular dynamics of the ions. It is found that the stronger the laser intensity, the more the energies are absorbed by CO and the earlier the ionization takes place with more electrons emitted. Moreover, the bond length of CO is stretched associated with more violent contraction vibration. The dipole moment along the laser polarization is enlarged when the laser intensity is enhanced. This study on the influence of the polarization of laser pulse on the excitation of CO indicates that the ionization of CO is maximized and the contraction vibration becomes most violent when the laser is polarized along the molecular axis. Ionization is restrained when the polarization angle is increased and the dipole vibration shows a strong dependence on the laser polarization. Furthermore, it is found that the electron density surrounding the carbon atom is distributed along the molecular axis particularly when the dispersion of the electrons around the oxygen atom is greatly influenced by the laser polarization.

Keywords: TDDFT, the molecular dynamics, the ionization of molecules

PACS: 31.15.ee, 34.50.Gb, 34.80.Gs

DOI: 10.7498/aps.62.233102

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61178032), the Fundamental Research Funds for the Central Universities (Grant No. 11A21), and the "Eleven Five" planning issues for higher education of Jiangsu province (Grant No. JS053).

[†] Corresponding author. E-mail: zpwang03247@163.com