

# $H_2^+$ 在阿秒以及双色飞秒激光脉冲中解离时 电子位置的相干控制\*

徐天宇 何峰†

(上海交通大学物理系, 激光等离子体教育部重点实验室, 上海 200240)

(2012年9月5日收到; 2012年10月19日收到修改稿)

通过求解含时薛定谔方程, 提出了利用三束激光脉冲控制  $H_2^+$  解离以及解离过程中电子位置的方案. 第一束阿秒激光脉冲将  $H_2^+$  从  $1s\sigma_g$  激发至  $2p\sigma_u$ , 在  $H_2^+$  的解离过程中, 引入两束波长分别为 800 nm 与 400 nm 的飞秒激光脉冲控制电子在分子内部的运动. 通过改变两束激光脉冲的绝对相位,  $H_2^+$  解离后电子的位置可以得到有效控制 (最大有 86% 的概率使得电子附着在某一个原子核上). 现有的激光技术条件可以在实验上实现这一理论方案.

**关键词:** 相干控制, 电子位置, 不对称性参数,  $H_2^+$

**PACS:** 82.50.Nd, 82.53.Eb, 67.80.ff

**DOI:** 10.7498/aps.62.068201

## 1 引言

物理学家的终极目标之一是通过观测化学反应的现象, 理解化学反应的本质并进而控制化学反应的过程及生成物. 因为化学键的断裂与形成往往发生在极短的时间之内, 所以直至飞秒与阿秒激光脉冲诞生之后, 人们才得以通过观测超短激光与物质相互作用的过程以及结果来探究分子离子在化学反应中的超快动力学过程<sup>[1,2]</sup>. 随着实验条件的日趋成熟, 目前已经能够制备具有稳定强度与相位的飞秒脉冲, 另外阿秒脉冲的脉宽最短可以达到 80 as<sup>[3,4]</sup>.

从结构简单的分子离子 ( $H_2^+$ ,  $HD^+$ ,  $D_2^+$ ) 出发, 一系列物理规律已被发现, 如阈上解离 (ATD)<sup>[5]</sup>、键软化 (bond-softening)<sup>[6,7]</sup>、键硬化 (bond-hardening)<sup>[8]</sup>、高次谐波 (HHG)<sup>[9-12]</sup> 等等. 对于分子离子的解离, 理论上, 人们往往通过尝试不同的激光方案来研究相应的物理过程<sup>[13-17]</sup>. 2004年, Roudnev等<sup>[18]</sup>论证了通过一束载波相位可调的飞秒脉冲能够控制  $HD^+$  的解离过程, 这一

理论方案随后被 Kling等<sup>[19]</sup>在实验上实现. 2007年, He等<sup>[20]</sup>提出用一束阿秒脉冲与一束飞秒脉冲控制  $H_2^+$  的解离并发现电子位置的相干控制度超过 80%, 这一理论方案最近由 Sansone等<sup>[21]</sup>在实验上实现. 2008年, He等<sup>[22]</sup>研究了阿秒激光脉冲链以及飞秒激光脉冲与  $H_2^+$  的相互作用, 研究发现当阿秒脉冲链之间的时间间隔为飞秒激光脉冲周期的半整数倍时, 电子的位置不能被相干控制; 当阿秒脉冲链之间的时间间隔为飞秒激光脉冲周期的整数倍时, 电子的位置可以被有效控制. 这一理论方案已被 Singh等<sup>[23]</sup>的实验验证. 2009年, Ray等<sup>[24]</sup>在实验上利用双色飞秒脉冲和  $D_2$  相互作用, 研究了  $D_2$  单电离之后的解离. 2012年, Castrillo等<sup>[25]</sup>利用两束 UV 激光脉冲与  $H_2$  相互作用,  $H_2$  从基态跃迁至激发态随后发生单电子电离, 通过分析  $H_2^+$  解离后电子的不对称性参数, 研究了  $H_2$  处于激发态时原子核波函数的变化规律. 进一步, 随着实验技术的日益完善, 研究的对象正逐渐朝着结构更复杂的大分子推进<sup>[26]</sup>. 2008年, McKenna等<sup>[27]</sup>研究了飞秒激光脉冲与  $ND^+$  的相互作用, 研究

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11104180, 11175120)、上海市浦江人才基金 (批准号: 11PJ1404800)、上海市自然科学基金 (批准号: 11ZR1417100) 和霍英东青年教师基金 (批准号: 131010) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: fhe@sju.edu.cn

发现在  $2 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2 - 3 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$  的范围内改变光强,  $\text{ND}^+$  解离后电子的位置可以得到显著调控. 2009 年, Znakovskaya 等 [28] 研究了  $\text{CO}^+$  单电离之后的解离过程, 发现  $\text{CO}^+$  解离后电子位置的不同主要由单电子的电离以及  $\text{CO}^+$  激发态之间的耦合所调控. 2010 年, Betsch 等 [29] 利用两束相对相位可调的飞秒激光脉冲能够有效地控制  $\text{N}_2^+$ ,  $\text{CO}^+$  等分子的解离过程. 2011 年, Zohrabi 等 [30] 通过强场下  $\text{O}_2^+$  的解离过程研究了原子核波函数的变化规律. 同年, Liu 等 [31] 利用飞秒脉冲研究了  $\text{CO}$  的解离过程, 发现多种解离渠道之间的耦合导致了解离后电子位置的不同.

尽管实验已经拓展到了激光和大分子的研究, 但在理论上进行完全维度的关于大分子的量子计算仍然超出了目前计算机的能力. 对于最简单的分子  $\text{H}_2^+$ , 理论上可以开展比较精确的计算, 因此  $\text{H}_2^+$  成为了理论研究最常用的一种研究对象. 然而, 人们关于  $\text{H}_2^+$  的理解也远未达到完全理解. 本文利用数值模拟含时薛定谔方程的方法研究了  $\text{H}_2^+$  在三束

激光作用下的解离过程. 第一束阿秒激光脉冲激发  $\text{H}_2^+$ , 此过程由 Franck-Condon 近似描述, 即  $\text{H}_2^+$  开始解离时刻的原子核波函数可由  $\text{H}_2^+$  的基态原子核波函数代替. 在  $\text{H}_2^+$  解离的过程中, 引入两束飞秒激光脉冲, 波长分别为 800 nm 与 400 nm, 通过改变这两束激光脉冲的绝对相位,  $\text{H}_2^+$  解离后电子的位置可以得到有效控制.

## 2 理论模型

将  $\text{H}_2^+$  置于强激光场中, 典型的反应有两种. 第一种是  $\text{H}_2^+$  的电离:  $\text{H}_2^+$  从激光场中吸收了足够多的能量, 发生单电子电离, 余下的两个质子发生库仑爆炸, 最终形成三个独立的粒子. 第二种是  $\text{H}_2^+$  的解离:  $\text{H}_2^+$  从激光场中吸收的能量不足以使其发生电离, 只能从基态跃迁至激发态, 由于激发态不稳定,  $\text{H}_2^+$  发生解离, 两个质子之间的库仑斥力使得它们之间的距离逐渐增大, 最终形成一个氢原子与一个处于自由态的质子.

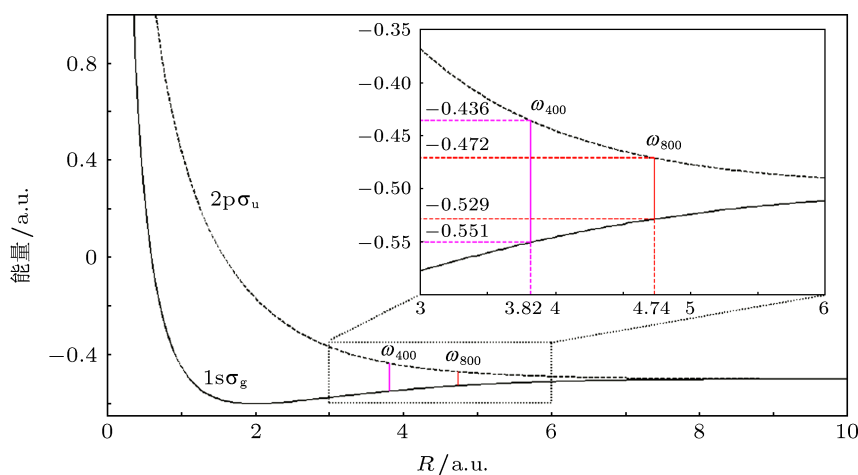


图1  $\text{H}_2^+$  的能级曲线. 黑实线与黑虚线分别表示电子处于基态与第一激发态, 内置放大图描述了共振吸收或辐射  $\omega_{400}$  和  $\omega_{800}$  对应的原子核间距与分子势能

$\text{H}_2^+$  在超短激光场中的动力学过程由含时薛定谔方程来描述. 因为超短激光脉冲的时间尺度在阿秒或飞秒量级且原子核的振动时间尺度在飞秒量级, 故可忽略时间尺度在皮秒量级的原子核转动过程. 假设一束线偏振的超短激光脉冲与  $\text{H}_2^+$  相互作用, 激光的偏振方向与分子轴的取向相平行. 在本文的激光强度下, 使用 ADK 理论 [32] 估算得到的电离率小于  $10^{-22}$ , 因此我们忽略了电离过程. 对于  $\text{H}_2^+$ ,  $2p\pi_u$  与  $2p\pi_g$  的势能面远高于  $2p\sigma_u$ , 而且当激光偏振方向和分子轴平行时, 跃迁概率几乎为 0. 对

于更高的激发态, 在本文使用的阿秒激光频率条件下, 仍需要多个光子才能抽运. 而长波长激光导致的基态和高激发态之间的跃迁概率更是大大减小. 通过和非波恩 - 奥本海默近似的全量子计算 [16] 比较, 当少周期激光脉冲强度低于  $10^{14} \text{ W/cm}^2$ , 波长大于 100 nm 时,  $1s\sigma_g$  和  $2p\sigma_u$  两个态的耦合在  $\text{H}_2^+$  的解离过程中占绝对主导地位 [33,34]. 图 1 是  $\text{H}_2^+$  基态和第一激发态能级曲线 (本文各物理量除特别说明均使用原子单位 atomic units, a.u.). 因此, 在波恩 - 奥本海默近似 [35] 下,  $\text{H}_2^+$  的波函数可以近似地

表示为

$$\Psi(R, \mathbf{x}; t) \approx \chi_g(R, t) \varphi_g(R, \mathbf{x}) + \chi_u(R, t) \varphi_u(R, \mathbf{x}). \quad (1)$$

其中  $R$  为两个质子之间的距离,  $\mathbf{x}$  为电子的坐标;  $\varphi_g(R, \mathbf{x})$  与  $\varphi_u(R, \mathbf{x})$  表示  $\text{H}_2^+$  处于基态与第一激发态的电子波函数,  $\chi_g(R, t)$  与  $\chi_u(R, t)$  则表示对应的原子核波函数.  $\text{H}_2^+$  的解离可以近似地由以下二能级方程来描述

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \chi_g(R, t) \\ \chi_u(R, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_R + V_g(R) & V_{gu}(R, t) \\ V_{gu}(R, t) & T_R + V_u(R) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \chi_g(R, t) \\ \chi_u(R, t) \end{pmatrix}, \quad (2)$$

其中,  $T_R = \frac{1}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial R^2}$  表示原子核的振动算符,  $\mu = 918$  是两个原子核的约化质量,  $V_{gu}(R, t) = -E(t) \cdot \langle \varphi_g(R, \mathbf{x}) | \mathbf{x} | \varphi_u(R, \mathbf{x}) \rangle$  描述两个态之间的偶极相互作用.

在数值模拟中, 激光场的方程表示为  $E(t) = E_1(t) + E_2(t)$ , 其中  $E_1(t) = E_0 \sin(\omega_{800}t + \phi_{800})$  与  $E_2(t) = E_0 \sin(\omega_{400}t + \phi_{400})$  分别表示 800 nm 与 400 nm 的激光脉冲,  $\phi_{800}$  与  $\phi_{400}$  则表示对应激光场的绝对相位, 激光的强度均为  $3 \times 10^{12} \text{ W/cm}^2$ . 图 2 描述了两束飞秒激光脉冲叠加后的激光场. 在计算中, 原子核间距  $R$  的范围在 0—40, 空间步长为  $\Delta R = 0.04$ , 两束脉冲长度均为  $6T_{800}$ , 其中  $T_{800} = 2\pi/\omega_{800}$ , 时间步长为  $\Delta t = 1$ . 为了抑制波函

数在边界的反射, 在靠近模拟边界的区域采用衰减函数<sup>[36]</sup>

$$M = \cos^{1/8} \left( \frac{R - R_a \pi}{R_L} \right) \quad R > R_a, \quad (3)$$

其中  $R_a = 35, R_L = 5$ .

电子在第一个原子核与第二个原子核上的原子态可以由  $\varphi_l(R, \mathbf{x})$  与  $\varphi_r(R, \mathbf{x})$  表示

$$\varphi_l(R, \mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_g(R, \mathbf{x}) + \varphi_u(R, \mathbf{x})), \quad (4)$$

$$\varphi_r(R, \mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\varphi_g(R, \mathbf{x}) - \varphi_u(R, \mathbf{x})). \quad (5)$$

因此, 电子在两个原子核上的概率分别为

$$W_l(P_R; t) = |\langle \varphi_l(R, \mathbf{x}) | \tilde{\Psi}(P_R, \mathbf{x}; t) \rangle|^2 = \frac{1}{2} |\chi_g(P_R, t) + \chi_u(P_R, t)|^2, \quad (6)$$

$$W_r(P_R; t) = |\langle \varphi_r(R, \mathbf{x}) | \tilde{\Psi}(P_R, \mathbf{x}; t) \rangle|^2 = \frac{1}{2} |\chi_g(P_R, t) - \chi_u(P_R, t)|^2, \quad (7)$$

其中,  $\tilde{\Psi}(P_R, \mathbf{x}; t)$  是对  $\Psi(R, \mathbf{x}; t)$  傅里叶变换的结果,  $P_R$  为单个质子的动量. 在统计解离部分的信息时, 我们令  $\Psi(R, \mathbf{x}; t)|_{R \leq 10} = 0$ , 即去除束缚态波函数. 由每个质子的动能  $E_R = P_R^2/4\mu$  可得

$$W_l(E_R; t) = \frac{2\mu}{P_R} W_l(P_R; t), \quad (8)$$

$$W_r(E_R; t) = \frac{2\mu}{P_R} W_r(P_R; t). \quad (9)$$

为了描述  $\text{H}_2^+$  解离后电子的位置, 我们定义了不对称性参数

$$A(E_R, \alpha) = \frac{W_l(E_R, \alpha) - W_r(E_R, \alpha)}{W_l(E_R, \alpha) + W_r(E_R, \alpha)}, \quad (10)$$

其中  $\alpha$  为激光参数, 即  $\alpha = \alpha(\phi_{800}, \phi_{400})$ .

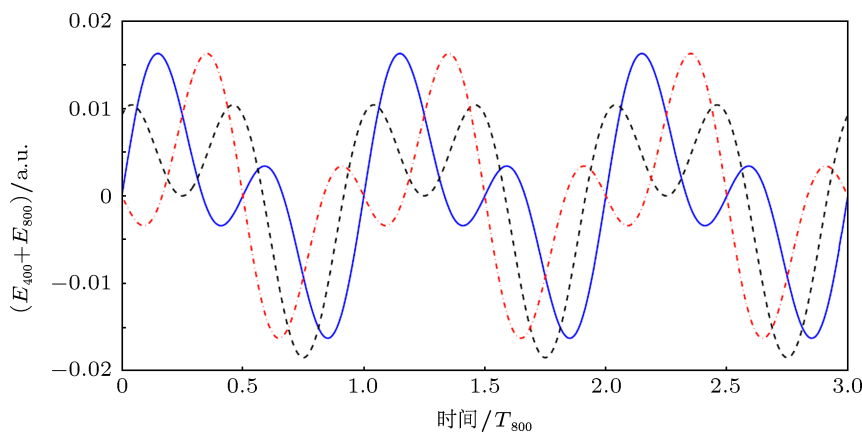


图 2 800 nm 与 400 nm 脉冲叠加之后的激光场 其中  $\phi_{800} = 0$ , 蓝实线、黑虚线与红点画线分别对应  $\phi_{400}$  为 0,  $0.5\pi$  与  $\pi$  的三种情况

### 3 结果与讨论

为了研究  $\text{H}_2^+$  在双色激光场中的物理过程, 选取激光参数  $\phi_{800} = \pi/2$ ,  $\phi_{400} = \pi/2$ , 观察  $\text{H}_2^+$  解离后的归一化质子能谱分布. 图 3(a) 描述了  $\text{H}_2^+$  通过  $1s\sigma_g$  (实线) 与  $2p\sigma_u$  (虚线) 能量曲线解离后得到的质子能谱. 图 3(b) 描述了  $\text{H}_2^+$  解离后电子处于第一个 (实线) 与第二个 (虚线) 原子核上的归一化质子能谱. 图 3(b) 中三个不同的峰值是由 4 种不同的解离过程所导致的. 第一种是  $\text{H}_2^+$  沿着  $2p\sigma_u$  态的能量曲线直接解离, 解离后质子的动能约为  $E_{\text{final}} \approx (E_0 - E_\infty)/2 \approx 0.163$ , 这对应于最右边的峰值 ( $p_3$ ), 其中  $E_0 \approx -0.174$  与  $E_\infty = -0.500$  分别表示  $\text{H}_2^+$  解离初态与末态所具有的分子势能.  $\text{H}_2^+$  共振吸收或者辐射  $\omega_{400}$  以及  $\omega_{800}$  时对应的原子核间距如图 1 中内置放大图所示. 第二种是  $\text{H}_2^+$  先由  $2p\sigma_u$  解离, 随着原子核间距的增大, 当  $R = 3.82$  时,  $V_g(R)$  与  $V_u(R)$  所对应的能量差为  $\omega_{400}$ , 此时在 400 nm 激光的作用下,  $\text{H}_2^+$  有一定的概率通过辐射一个 400 nm 的光子 ( $\omega_{400} = 0.114$ ) 跃迁至  $1s\sigma_g$ , 在剩余的解离过程中有  $\Delta E = V_g(\infty) - V_g(R_{400}) \approx 0.051$  的动能转换为了势能. 因此,  $E_{\text{final}} \approx (E_0 - E_\infty - \omega_{400} - \Delta E)/2 \approx 0.080$ , 这对应于最左边的峰值 ( $p_1$ ). 第三种是在  $\text{H}_2^+$  由  $2p\sigma_u$  解离的过程中, 当  $R = 4.74$  时,  $V_g(R)$  与  $V_u(R)$  所对应的能量差为  $\omega_{800}$ , 此时在 800 nm 激光的

作用下,  $\text{H}_2^+$  可以通过辐射一个 800 nm 的光子 ( $\omega_{800} = 0.057$ ) 跃迁至  $1s\sigma_g$ , 在接下来的解离过程中, 有  $\Delta E = V_g(\infty) - V_g(R_{800}) \approx 0.029$  的动能转化为了势能. 所以,  $E_{\text{final}} \approx (E_0 - E_\infty - \omega_{800} - \Delta E)/2 \approx 0.120$ , 这对应于中间的峰值 ( $p_2$ ). 第四种是在  $\text{H}_2^+$  由  $2p\sigma_u$  解离的过程中, 当  $R = 3.82$  时,  $\text{H}_2^+$  可以通过辐射一个 400 nm 的光子跃迁至  $1s\sigma_g$ , 接着有  $\Delta E = V_g|_{R=4.74} - V_u|_{R=3.82} \approx 0.022$  的动能转化为了势能. 当  $R = 4.74$  时,  $\text{H}_2^+$  可以通过吸收一个 800 nm 的光子重新跃迁至  $2p\sigma_u$ , 然后继续解离. 因此,  $E_{\text{final}} \approx (E_0 - E_\infty - \omega_{400} - \Delta E + \omega_{800})/2 \approx 0.124$ , 这对应于中间的峰值 ( $p_2$ ). 图 3(c) 显示了当  $\phi_{400} = \pi$  时, 不对称性参数随质子能量与  $\phi_{800}$  的变化. 对于某一质子能量, 改变  $\phi_{800}$ , 不对称性参数呈现周期性的变化.

若不考虑电子位置对质子能量的依赖关系, 可将不对称性参数中的质子能量做积分, 即

$$A(\alpha) = \frac{\int dE_R (W_l(E_R, \alpha) - W_r(E_R, \alpha))}{\int dE_R (W_l(E_R, \alpha) + W_r(E_R, \alpha))}, \quad (11)$$

$A(\alpha)$  描述了电子在两个原子核上分布的不对称性程度. 图 4 显示了不对称性参数随 800 nm 与 400 nm 激光脉冲相位的变化. 当  $\phi_{800} = 0.4\pi$ ,  $\phi_{400} = 1.4\pi$  时, 不对称性参数为 0.7, 反映了电子有 86% 的概率附着在第一个原子核上. 因此我们期望实验上可以通过控制两束激光脉冲的相位来控制电子的位置.

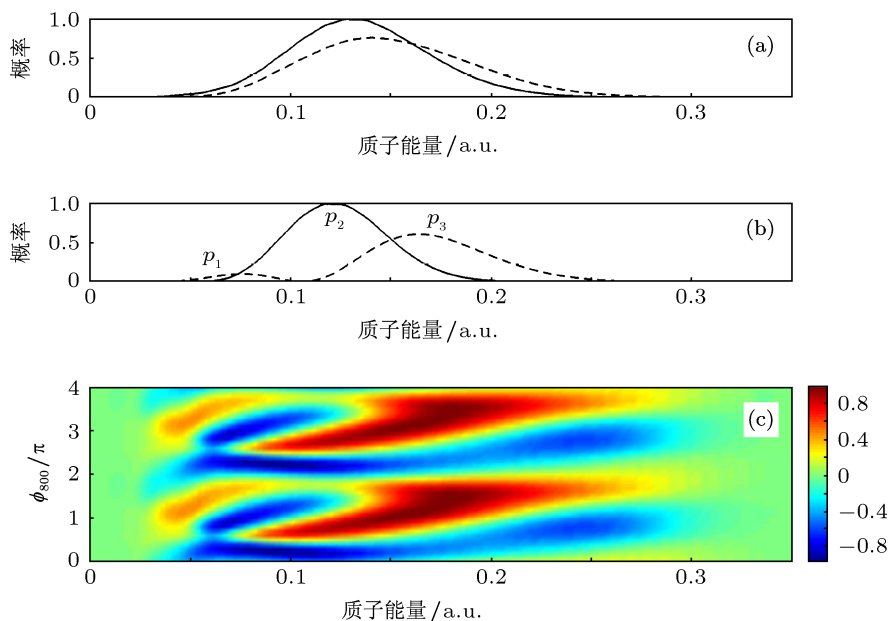


图 3 当  $\phi_{800} = \pi/2$ ,  $\phi_{400} = \pi/2$  时 (a)  $\text{H}_2^+$  由  $1s\sigma_g$  (实线) 与  $2p\sigma_u$  (虚线) 当  $t = 6T_{800}$  时解离的质子能谱; (b)  $\text{H}_2^+$  解离后电子处于第一个 (实线) 与第二个 (虚线) 原子核上的归一化质子能谱.  $p_1$ ,  $p_2$  与  $p_3$  分别表示图中曲线的三个峰值; (c) 为当  $\phi_{400} = \pi$  时, 不对称性参数随质子能量与  $\phi_{800}$  的变化

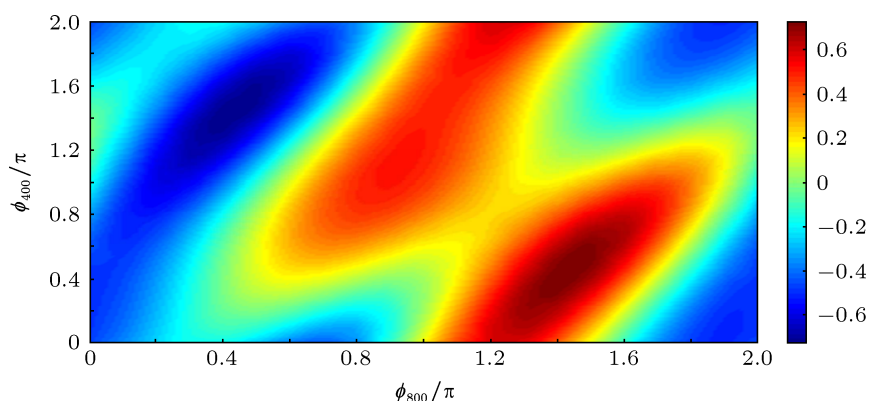


图4 不对称性参数随 800 nm 与 400 nm 激光脉冲相位的变化

相比于一束阿秒激光脉冲和一束 800 nm 激光脉冲控制  $\text{H}_2^+$  解离过程中电子位置的方案 [15], 此方案在某些方面具有优越性. 例如当  $\phi_{400} \in (0.6\pi, 1.2\pi)$ ,  $\phi_{800} \in (0.6\pi, 2\pi)$  时, 不对称性参数一直为正. 因此, 实验上即使激光脉冲的相位不能精确锁定, 仍然可以利用此方案对电子位置进行相干控制. 这一方案降低了实验对光脉冲的要求.

## 4 结论

本文提出了利用阿秒激光脉冲控制  $\text{H}_2^+$  的激

发, 再利用双色飞秒激光脉冲 (800 nm + 400 nm) 控制  $\text{H}_2^+$  解离过程中电子位置的新方法. 数值模拟研究表明, 电子位置的相干控制可以通过调制两束飞秒激光脉冲的绝对相位来实现. 电子的位置与原子核的能量有较强的依赖关系. 通过选取合适的激光参数, 电子有接近 90% 的可能性选择性地附着在某一个原子核上. 我们期望实验上能够通过两束相位无须精确锁定的飞秒激光脉冲即可控制电子的位置.

- [1] Rosker M J, Dantus M, Zewail A H 1988 *Science* **241** 1200
- [2] Krausz F, Ivanov M 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 163
- [3] Sansone G, Benedetti, Calegari F, Vozzi C, Avaldi L, Flammini R, Poletto L, Villoresi P, Altucci C, Velotta R, Stagira S, Silvestri D S, Nisoli M 2006 *Science* **314** 443
- [4] Guo F M, Yang Y J, Jin M X, Ding D J, Zhu Q R 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 053201
- [5] Suzor G A, He X, Atabek O, Mies F H 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 515
- [6] Bandrauk A D, Sink M L 1981 *J. Chem. Phys.* **74** 1110
- [7] Bucksbaum P H, Zavriyev A, Muller H G, Schumacher D W 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 1883
- [8] Frasinski L J, Posthumus J H, Plumridge J, Codling K 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 3625
- [9] McPherson A, Gibson G, Jara H, Johann U, Luk T S, McIntyre I A, Boyer K, Rhodes C K 1987 *J. Opt. Soc. Am. B* **4** 495
- [10] Ferray M, L'Huillier A, Li X F, Lompré L A, Mainfray G, Manus C 1988 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **21** L31
- [11] Zeng Z N, Li R X, Xie X H, Xu Z Z 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2316 (in Chinese) [曾志男, 李儒新, 谢新华, 徐至展 2004 物理学报 **53** 2316]
- [12] Zhang F S, Cui L, Zeng X H, Gu B 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2972 (in Chinese) [张丰收, 崔磊, 曾祥华, 顾斌 2006 物理学报 **55** 2972]
- [13] Zair A, Torres R, Plaja L 2012 *New Trends in Attosecond Physics* (1st Ed.) (Berlin: Springer-Verlag)
- [14] He F, Becker A 2008 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 074017
- [15] He F, Thumm U 2010 *Phys. Rev. A* **81** 053413
- [16] He F, Becker A, Thumm U 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 213002
- [17] Wang R, Niu Y Y, Cong S L 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 3400
- [18] Roudnev V, Esry B D, Itzhak I B 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 163601
- [19] Kling M F, Siedschlag C, Verhoef A J, Khan J I, Schultze M, Uphues T, Ni Y, Uiberacker M, Drescher M, Krausz F, Vrakking J J M 2006 *Science* **312** 246
- [20] He F, Ruiz C, Becker A 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 083002
- [21] Sansone G, Kelkensberg F, Pére-Torres J F, Morales F, Kling M F, Siu W, Ghafur O, Johnsson P, Swoboda M, Benedetti E, Ferrari F, Lépine F, Sanz-Vicario J L, Zherebtsov S, Znakovskaya I, L'Huillier A, Ivanov M Y, Nisoli M, Martin F, Vrakking M J J 2010 *Science* **465** 763
- [22] He F, Ruiz C, Becker A 2008 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 081003
- [23] Singh K P, He F, Ranitovic P, Cao W, De S, Ray D, Chen S, Thumm U, Becker A, Murnane M M, Kapteyn H C, Litvinyuk I V, Cocke C L 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 023001
- [24] Ray D, He F, De S, Cao W, Mashiko H, Ranitovic P, Singh K P, Znakovskaya I, Thumm U, Paulus G G, Kling M F, Litvinyuk I V, Cocke C L 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 223201
- [25] Castrillo A G, Palacios A, Bachau H, Martín F 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 063009
- [26] Su Q Z, Niu Y Y, Cong S L 2010 *Chin. Phys. Lett.* **27** 093401
- [27] McKenna J, Saylor A M, Gaire B, Johnson N G, Parke E, Carnes K D, Esry B D, Ben-Itzhak I 2008 *Phys. Rev. A* **77** 063422
- [28] Znakovskaya I, von den Hoff P, Zherebtsov S, Wirth A, Heerwerth O,

- Vrakking M J J, de Vivie-Riedle R, Kling M F 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 103002
- [29] Betsch K J, Pinkham D W, Jones R R 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 223002
- [30] Zohrabi M, Mckenna J, Gaire B, Johnson N G, Carnes K D, De S, Bocharova I A, Magrakvelidze M, Ray D, Litvinyuk I V, Cocke C L, Ben-Itzhak I 2011 *Phys. Rev. Lett.* **83** 053405
- [31] Liu Y, Liu X, Deng Y, Wu C, Jiang H, Gong Q 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 073004
- [32] Ammosov M V, Delone N B, Krainov V P 1986 *Sov. Phys. JETP* **64** 1191
- [33] Bates D R, Ledsham K, Stewart A L 1953 *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **246** 215
- [34] Charron E, GiustiSuzor A, Meis F H 1995 *J. Chem. Phys.* **103** 7359
- [35] Born M, Oppenheimer J R 1927 *Ann. Phys.* **84** 457
- [36] He F, Ruiz C, Becker A 2007 *Phys. Rev. A* **75** 053407

# Control of electron localization in the dissociation of $H_2^+$ using attosecond and two-color femtosecond pulses\*

Xu Tian-Yu He Feng<sup>†</sup>

(Key Laboratory for Laser Plasma (Ministry of Education), Department of Physics, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

(Received 5 September 2012; revised manuscript received 19 October 2012)

## Abstract

We study the control of electron localization in the dissociation of  $H_2^+$  using three laser pulses by numerically simulating the time-dependent Schrödinger equation. First, we use an attosecond pulse to excite the wave packet of  $H_2^+$  from  $1s\sigma_g$  to  $2p\sigma_u$ . Then, two-color femtosecond pulses (800 nm + 400 nm) are used to control the dissociation of  $H_2^+$ . By manipulating the phases of two femtosecond pulses, the electron localization can be controlled effectively. For the proper laser parameters, the maximal probability that the electron is located on the selective nucleus is up to 90%. This theoretical scheme can be realized by the state-of-art laser technology.

**Keywords:** coherent control, electron localization, asymmetry parameter,  $H_2^+$

**PACS:** 82.50.Nd, 82.53.Eb, 67.80.ff

**DOI:** 10.7498/aps.62.068201

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11104180, 11175120), the Pu-Jiang Scholar Foundation of Shanghai, China (Grant No. 11PJ1404800), the Natural Science Foundation of Shanghai, China (Grant No. 11ZR1417100), and the Fok Ying-Tong Education Foundation for Young Teachers in the Higher Education Institutions of China (Grant No. 131010).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: fhe@sjtu.edu.cn