

D_2^+ 强场解离的电子局域化随激光波长的非线性变化*

季玲玲[†] 童明强 王玉华

(武汉科技大学应用物理系, 武汉 430081)

(2014年1月5日收到; 2014年5月7日收到修改稿)

研究了周期量级激光脉冲的波长变化对氘分子离子 D_2^+ 强场解离过程中电子局域化的影响. 通过求解波恩-奥本海默近似下关于核波包演化的双能级含时薛定谔方程, 发现电子局域化的不对称性对激光波长有反常的依赖关系. 电子局域程度随着波长的增加呈现增强的趋势, 但在某些波长范围内电子局域化出现了显著的衰减. 导致电子局域化程度被削弱的直接原因是在某些波长下不同振动态的电子局域化对脉冲载波包络相位的响应出现了反相抵消. 分析表明, 当波长发生变化时, 决定电子局域化的核运动和电子运动在外场作用下出现不一致的运动响应, 最终导致了电子局域化的非线性变化.

关键词: 分子解离, 电子局域化, 强场动力学

PACS: 03.65.-w, 82.37.Vb, 87.15.mk

DOI: 10.7498/aps.63.180301

1 引言

分子内部的核子与电子的关联运动在化学键的形成与断裂中扮演着重要的角色. 在过去的二十多年里, 科学家深入地研究了激光与物质相互作用过程中的电子动力学过程, 试图实现对化学反应的超快调控^[1-5]. 目前, 通过利用先进的飞秒激光技术, 科学家们已经能够在亚飞秒时间尺度内观察、探测甚至控制激光与物质相互作用过程中的超快动力学过程^[6-11], 如电子关联^[12,13]、高次谐波^[14-20]、金属表面导带电子的发射^[21]以及分子轨道成像^[22]等.

由于分子系统的动力学过程不仅包括电子运动, 还包括核运动^[23], 因此, 在研究激光与分子相互作用时, 需要同时考虑核子和电子的运动以及两者之间的关联运动^[24-26]. 通过对结构简单的分子 H_2 及其同位素分子 (D_2 和 T_2) 的强场动力学的研究, 科学家已经发现了一些激光诱导的分子动力学

过程及相应的机制^[2], 其中分子解离过程中电子局域化^[27]的研究在近几年逐渐成为一个热门的研究课题^[28-32]. 这是因为在分子内部控制电子局域化过程对于阿秒时间尺度内控制许多物理和化学过程是相当重要的^[7,8,33,34].

德国科学家 Kling 等^[27]所完成的电子局域化调控的实验是该领域的一个里程碑. 在他们的实验中, 利用了周期量级 (即一个脉冲中只包含几个光周期) 的载波包络相位 (carrier-envelope phase, CEP) 稳定的脉冲首次实现了光场对分子解离过程中电子局域化的控制. 该工作引起了强场领域研究人员的广泛关注. 通过理论和实验研究, 研究人员提出了多种方案来控制并解释了氢分子^[26-28]及异核分子^[29,30]强场解离中的电子局域化过程. 但是, 由于超快放大器技术的限制, 过去的实验研究所使用的控制脉冲波长主要是在近红外区域, 即 800 nm 左右. 这在一定程度上限制了对电子局域化研究的发展.

* 国家自然科学基金 (批准号: 10904120) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: jilingling@wust.edu.cn

很多的强场物理研究已经表明, 中红外波段 (> 1200 nm) 的激光脉冲会显著改变分子的电子运动 [35-37] 和核运动过程 [38], 而电子与核的运动与电子局域化过程是密切相关的. 因此, 了解激光波长如何影响分子解离中电子局域化是相当重要的, 这将有利于进一步探讨强场分子解离的电子局域化的物理机制. 此外, 随着近几年红外光参量放大器系统的发展 [39,40], 中红外脉冲已逐渐被用来研究及控制各种强场与物质超快相互作用中电子的动力学过程 [41-43]. 针对波长变化对分子解离过程中电子局域化的影响进行研究, 将能够为强场物理和化学反应控制的实验研究提供非常有价值的理论指引.

最近, Liu 等 [44] 和 Znakovskaya 等 [45] 分别在理论和实验上研究了中红外脉冲作用下的分子不对称解离过程, 并得出了中红外脉冲更有利于控制电子局域化的结论. 然而, Liu 等的理论工作中只考虑了分子的振动基态, 并没有考虑振动激发态的影响, 而在实验当中, 分子通常会处在多个不同的振动激发态; Znakovskaya 等的实验工作中只是单独比较了 800 nm 脉冲和 2100 nm 的实验结果, 并没有给出 CEP 控制的电子局域不对称性随波长增加的逐步变化. 那么, 当波长从近红外波段逐渐过渡到中红外波段的过程中, 电子局域不对称到底是如何变化的, 这个变化是由怎样的动力学过程导致的, 以及电子局域不对称性是否随着波长的增加而线性增加等问题, 都需要进一步的研究. 本文研究了激光波长的变化对电子局域化的影响. 通过求解双能级模型的含时薛定谔方程, 计算了 800—2200 nm 范围的激光脉冲作用下 D_2^+ 的解离过程. 结果表明, 电子局域化的不对称性的幅值和相对相位都会随着波长有显著变化, 但电子局域化的最大不对称性随着波长的增加并非单调增加. 该反常现象与电场作用下的核运动和电子耦合是密切相关的.

2 理论模型

本文采用的是基于奥本海默近似的 D_2^+ 分子离子双能级模型. 双能级模型可以用 D_2^+ 的最低两个电子态来描述, 其含时薛定谔方程可以写成以下

形式 [25]:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \chi_g \\ \chi_u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\nabla^2}{2\mu} + V_g & V_{gu} \\ V_{gu}^* & -\frac{\nabla^2}{2\mu} + V_u \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \chi_g \\ \chi_u \end{pmatrix}, \quad (1)$$

式中, μ 表示两个核子的约化质量, V_g 和 V_u 分别是 1s 态和 2p 态在每个核间距下的势能, V_{gu} 是两个能级之间的耦合项,

$$V_{gu} = E(t) \times D_{gu}, \quad (2)$$

这里, D_{gu} 是两个电子态之间的电子跃迁偶极距; $E(t)$ 为电场, $E(t)$ 的具体形式为

$$E(t) = E_0 \exp \left[-2 \ln 2 (t/\tau)^2 \right] \cos(\omega t + \varphi),$$

其中, E_0 是电场的最大值, τ 是脉冲持续时间, ω 是中心频率, φ 是脉冲的 CEP.

在双能级模型中, 两个电子态 χ_g 和 χ_u 可以看作是二个独立原子的电子态 Ψ_l 和 Ψ_r 的线性叠加, 即

$$\chi_g = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_l + \Psi_r), \quad (3)$$

$$\chi_u = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_l - \Psi_r). \quad (4)$$

通过求解以上两式组成的方程组, 可以得到描述电子位于左边的核子或者右边的核子的波函数:

$$\Psi_l = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_g + \chi_u), \quad (5)$$

$$\Psi_r = \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_g - \chi_u). \quad (6)$$

此时, 通过对波函数 Ψ_l 和 Ψ_r 求模平方, 就可以得到电子处在某个核子附近的概率, 即

$$P_{l,r} = |\Psi_{l,r}|^2, \quad (7)$$

其中 $P_{l,r}$ 表示电子处在左边或者右边的核子的概率. 此时, 电子局域化不对称性定义为

$$A = \frac{P_l - P_r}{P_l + P_r}. \quad (8)$$

如图 1 所示, 当不对称性参数 A 为正, 表示电子波包 (实线) 主要分布在 z 轴正方向 (区域一); 当 A 为负, 表示电子波包 (虚线) 主要分布在 z 轴负方向 (区域二).

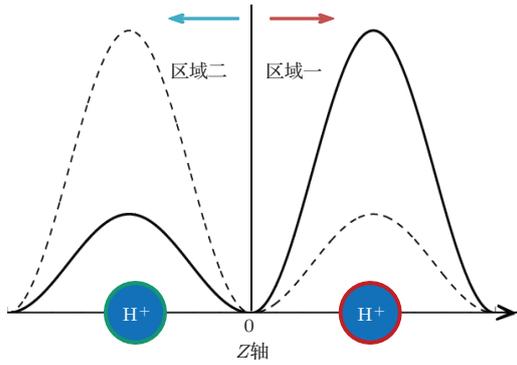


图1 电子不对称分布示意图 实线(虚线)表示不对称性 A 为正(负)的电子密度分布

3 结果与讨论

通过求解含时薛定谔方程(1), 我们模拟了 D_2^+ 在强度为 $1 \times 10^{14} \text{ W}\cdot\text{cm}^{-2}$ 、高斯包络且脉宽为三个光周期的激光脉冲作用下的解离过程. 其电场形式如图2所示, 其中实线表示电场, 虚线表示电场的包络 T_0 代表激光脉冲的一个光周期. 在计算中, 电场的 CEP 以及波长是变化的. 值得注意的是, 在实验上, D_2^+ 是通过使中性分子 D_2 电离一个电子之后产生的, 因此 D_2^+ 会在各个振动态上有一定的分布, 分布的概率可以根据 Franck-Condon (FC) 分布来计算得到^[30]. 由于在各个振动态上的分布是非相干的, 因此最终实验上观测到的结果是各个振动态的 FC 平均. 在模拟计算中, 为了与实验相符, 我们首先以每个振动态分别作为初态进行波函数的演化, 然后将各个振动态下的结果进行 FC 平均并得到最终结果.

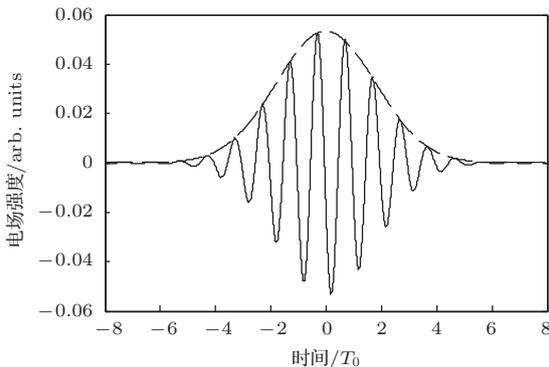


图2 激光脉冲的电场(实线)及其载波包络(虚线)

通过模拟不同激光参数下的解离过程, 我们计算并得到了相应的电子局域化不对称性 A 随波长以及 CEP 的二维变化, 其结果在图3(a)中给出.

在该二维灰度图中, 灰度较浅亮的表示大部分电子局域在左边的核子附近, 灰度较深暗的表示大部分电子局域在右边的核子附近. 我们在灰度条的 $A = 0.07$ 和 $A = -0.07$ 处分别加上黑色和白色的等高线, 以便更好地界定不对称性的过渡变化. 根据图3(a)中的结果可以看出电子局域不对称性随激光波长有显著的变化. 首先, 当波长小于 1200 nm 时, 不对称性比较弱, 也就是说, 近红外脉冲并不能高效地控制电子局域化; 而当波长大于 1200 nm 后, 不对称性 A 有显著的增强趋势. 其次, 可以看到图中有明显的倾斜条纹, 意味着在不同波长脉冲作用下不对称性的最大值出现在不同的 CEP 值处. 这说明波长变化时, 电子局域不对称性 A 所对应的相位也发生了偏移. 以上两个特征与文献中[44, 45]的结果是一致的.

然而, 我们的计算里考虑了 D_2^+ 的所有振动态的贡献, 并计算了波长连续变化的结果, 因此我们的结果能展示更多的细节, 并揭示更深层的物理过程. 从图3(a)中的结果可以看到一个反常的现象: 在某些波长范围里电子局域化随 CEP 的变化幅度会减小. 也就是说, 电子局域化的控制随着波长的增加并非单调变化. 为了更直观地呈现这个反常的现象, 图3(b)给出了每个波长所对应的电子局域化随 CEP 变化的幅值. 从图中可以看到, 当波长增加时, 电子局域化随 CEP 变化的幅值确实存在增长的趋势, 但很明显不是单调增长的. 其具体规律可以描述如下: 当波长小于 1200 nm 时, A_{max} 都比较小, 并呈现振荡变化; 当波长大于 1200 nm 时, A_{max} 开始显著增长, 但不是单调增加; 在波长约为 1600 nm 时, A_{max} 达到了一个较大的值, 但当波长增加到 1800 nm 左右时, A_{max} 却变小了, 不过依然比近红外波段的 A_{max} 大; 波长继续增加到 2100 nm 左右, A_{max} 又变大了, 并且比 1600 nm 时更大.

为了探讨电子局域化随着波长非线性增长的物理原因, 图4分别给出了 1600 1800 和 2100 nm 情况下的电子局域化在不同振动态下随 CEP 的变化. 从图中可以看到, 产生较大的电子局域化主要在 $v = 5$ 以上的振动态, 这是因为高振动态相对于低振动态具有更高的能量, 从而更容易发生解离. 但是, 在个别高振动态的情况下, 发现其电子局域化程度会变弱. 其具体原因将在后面分析. 从纵向

来看图 3 的三个波长下的结果, 可见 CEP 依赖的电子局域化随波长有显著的变化. 当波长为 1600 nm 时, 如图 4(a) 所示, 不同振动态下的电子局域化随 CEP 的变化基本上是同位相的, 因此, 在这种情况下, 对各个振动态的结果进行 FC 平均叠加之后, 就会产生较大的电子局域化不对称性, 如图 3 中的结果. 然而, 当波长为 1800 nm 时, 如图 4(b) 所示, 各个振动态的电子局域化相对于 CEP 发生了不同程度的相移. 如果产生较大电子局域化的第 6 振动态 ($v = 6$) 的 CEP 变化与较高振动态 ($v > 9$) 的正好反相, 那么, 在各个振动态的 FC 平均叠加之后会相互抵消. 也就是说, 尽管 1800 nm 提高了单个振动态的电子局域化程度, 但是在多个振动态的结果相干叠加之后, 由于不同振动态的电子局域化反相抵消, 最终导致了电子局域化不对称性的幅值反而变小, 如图 3(b) 所示. 当波长进一步增加到 2100 nm 时, 如图 4(c) 所示, 各振动态下的电子局域化继续发生相移, 但此时所有振动态的电子局域化的相位又重新变得一致, FC 平均叠加之后, 再次产生了较高的电子局域化不对称性. 总的来说, 当波长发生变化时, 各个振动态下所产生的电子局域化发生了不同程度的相位移动, 最终导致了电子局域化随波长的不规则变化.

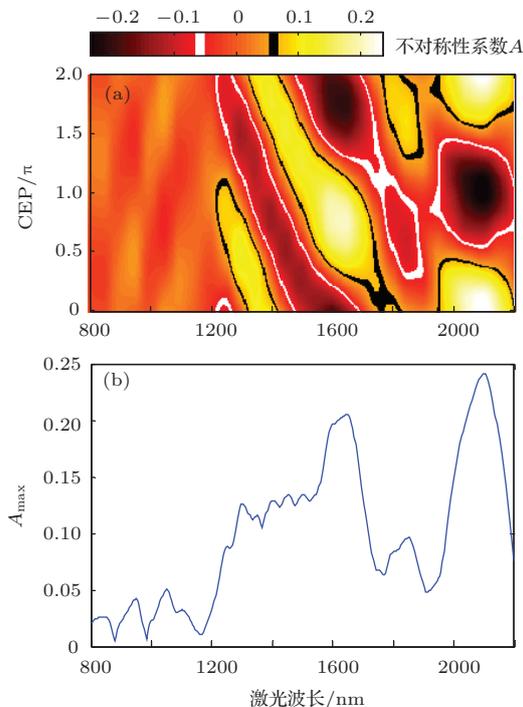


图 3 (网刊彩色) 电子局域化不对称性系数 A (a) A 随波长及 CEP 的变化; (b) A 随 CEP 变化的振幅 A_{\max} 对波长的非线性依赖

为了进一步理解不同振动态下的电子局域化的相位移的原因, 我们先给出 H_2^+ 解离过程中的电子局域化的动力学过程, 该过程通常可以用氢分子离子的两个最低电子态的波函数相干叠加过程来解释. 具体来说, 电子局域化过程可以按以下三步过程来理解^[29]: 第一步, 在脉冲作用下, 分子核波包通过不同的方式产生解离波包, 这些方式可以是核振动过程、电子再碰撞过程或者紫外脉冲激发过程等; 第二步, 解离波包往核间距较大的方向运动, 在几个飞秒时间之后到达单光子耦合点或多光子耦合点, 在外场的作用下, 解离波包在基态和第一激发态之间发生共振跃迁^[46]; 第三步, 处在基态(正则态)和第一激发态(反正则态)上的具有相同动能的解离波包发生相干叠加, 如图 5 的小图所示, 最终导致电子波包局域化在其中一个解离的核子附近.

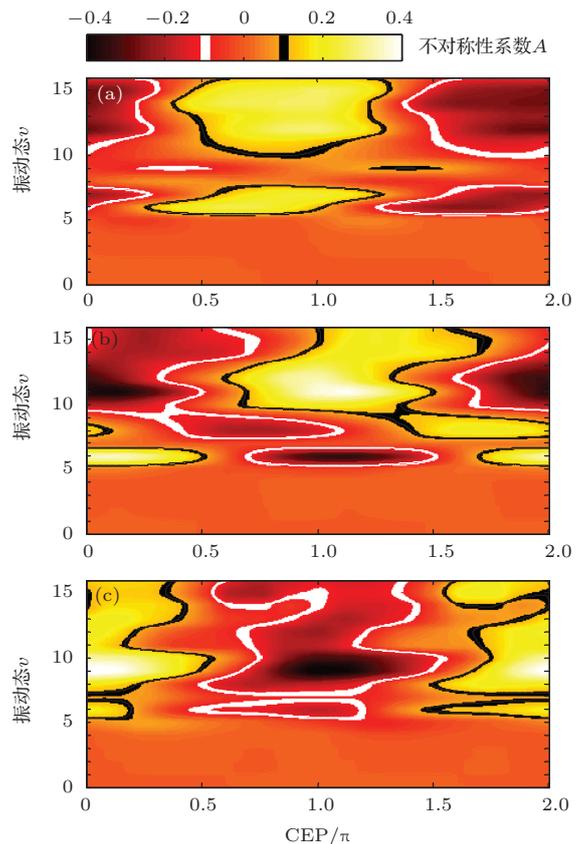


图 4 (网刊彩色) 各振动态下的电子局域化不对称性, 相应的波长分别为 (a) 1600 nm; (b) 1800 nm 和 (c) 2100 nm

利用上述的电子局域化的三步过程可以很好地解释电子局域化在不同振动态下相位发生偏移的原因. 如图 5 所示, 我们给出了 D_2^+ 的 1s 态和 2p

态的势能曲线,同时给出了三个振动态 ($v = 0, 6, 12$) 的核波包分布. 图5中的小图给出了核间距 $R = 10$ a.u. 时的 $1s$ 态和 $2p$ 态的电子波函数. 首先, 对于 $v = 0$ 振动态, 由于其振动能很低, 很难发生解离, 因此尽管波长发生了变化, $v = 0$ 振动态所对应的电子局域化不对称性都是相当微弱的. 而 $v = 6$ 和 $v = 12$ 都是较高的振动态, 较容易发生解离, 因此会有显著的电子局域化. 这些推论与图4给出的结果是一致的. 然而, 根据电子局域化的动力学机制可以知道, 电子局域化过程同时受到核运动与电子跃迁的影响. 对于单个振动态而言, 核波包在激光作用下开始向核间距较大的方向扩散, 当解离波包到达耦合区时, 电子将在电场作用下发生能级跃迁. 在这里, 核运动既与外加激光场有关, 也与核波包的初始分布有关, 而电子的运动又同时受到电场和核子运动所形成的新势能分布的影响. 因此, 当波长变化时, 核运动和电子运动都会发生变化, 并且不同振动态下的核波包的变化是不一样的. 当脉冲 CEP 改变时, 核运动与电子运动将做出不同的响应, 最终导致了在不同波长下电子局域化对 CEP 的依赖会发生相位移动.

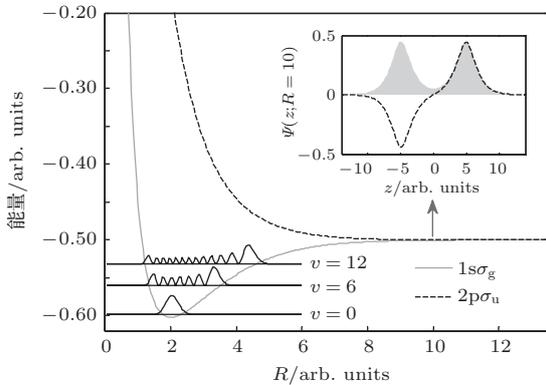


图5 D_2^+ 离子的能级曲线图及3个振动态 ($v = 0, 6, 12$) 的核波包分布, 小图给出了核间距为 10 a.u. 时的 $1s$ 正态和 $2p$ 反正态的电子波函数分布

为了进一步揭示强场分子解离过程中电子局域化随波长变化的物理机制, 下面利用准静态半经典模型^[47]对电子局域化的动力学过程进行分析. 首先定义两个准静态的波函数为

$$\Psi_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{2}} [(\cos \theta \pm \sin \theta) \Psi_l \pm (\cos \theta \mp \sin \theta) \Psi_r]. \quad (9)$$

$\Psi_{1,2}$ 与电子局域在左边或右边核子的波函数 $\Psi_{l,r}$ 相关, 其中

$$2\theta = \tan^{-1} \left(\frac{-2V_{gu}}{V_u - V_g} \right), \quad (10)$$

与之相应准静态的特征值可以由下面的式子得到

$$V_{1,2} = \frac{V_u + V_g}{2} \mp \sqrt{\frac{(V_u - V_g)^2}{4} + V_{gu}^2}. \quad (11)$$

过去的研究已经证明, 激光与分子相互作用的时候, 电子局域化的过程是由一个既不是绝热也不是非绝热的中间过程来建立的^[47]. 这个过程进行的程度可以通过跃迁参数 P_{ts} 来衡量

$$P_{ts}(t) = \exp \left\{ -\frac{\pi [V_u(\bar{R}) - V_g(\bar{R})]^2}{4\omega D_{gu}(\bar{R}) E_0(t)} \right\}, \quad (12)$$

其中, ω 是前面提到的激光频率,

$$E_0(t) = E_0 \exp[-2 \ln 2(t/\tau)^2]$$

是激光场的包络, \bar{R} 是随时间变化核波包的平均核间距, 由下面式子给出

$$\bar{R} = \langle \chi_g | R | \chi_g \rangle + \langle \chi_u | R | \chi_u \rangle. \quad (13)$$

这里, 我们选取第7振动态 ($v = 6$) 和第13振动态 ($v = 12$) 的 D_2^+ 分子离子作为研究目标, 分析其分别在 1600 nm 和 1800 nm 脉冲作用下的电子局域化过程, 如图6所示. 图6(a)给出了 1600 nm (粗虚线) 和 1800 nm (细实线) 脉冲的电场波形, 其 CEP 均为 π ; 图6(b)和(c)分别表示 1600 nm 脉冲作用下的跃迁参数和不对称性系数随时间的演化, 其中细线表示 $v = 6$ 的情况, 粗线表示 $v = 12$ 的情况; 图6(d)和(e)则表示 1800 nm 脉冲作用下相对应的物理量.

根据半经典模型, 电子局域化的过程是在 $0 < P_{ts} < 1$ 区间里完成的: 在相互作用前期, P_{ts} 接近于零, 电子波包在两个核子之间随着电场来回振荡, 因此其不对称性系数也随着电场波动; 当 $0 < P_{ts} < 1$ 时, 电子开始局域在某一个核子附近, 但此时电子波包仍随着电场有一定的波动; 直到脉冲的末端, 由于电场变弱以及核间距的增加, 电子波包不再在两核之间传输, 最终使得有较多的电子波包局域在其中一个核子附近, 这个过程与电场和分子系统是密切相关的. 由于高振动态的分子具有更大的振动能, 在解离发生时两个核子分离得更快, 因此在脉冲完全结束之前跃迁参数已经到了 1, 如图6(c)和(e)所示, 约在 20 fs 之后, 两个波长下的电子波包均主要局域在右侧(正方向)的核子附近. 但对于处于低振动态的分子, 两个核子分离得较慢, 因此电子局域化过程一直持续到脉冲结束

为止, 而不同波长的脉冲作用时间不一样, 导致电子局域化过程在不同的时刻结束, 使得来回振荡的电子波包最终局域在不同的核子附近, 如图 6(c) 和 (e) 所示. 以上的分析表明, 电子局域化过程不仅与电场相关, 同时还与分子在电场驱动下的核运动以及电子运动有关, 因此电子局域化的不对称性随波长的增加显现出非线性的变化.

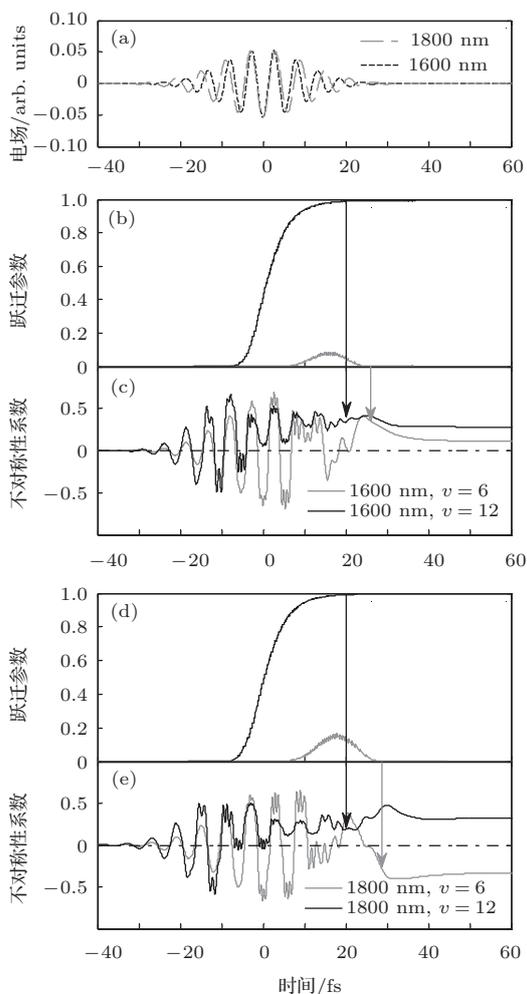


图6 强场分子解离过程中电子局域化的半经典分析 (a) 激光脉冲的电场; (b), (d) 跃迁参数 P_{ts} 随时间的变化; (c), (e) 不对称系数 A 随时间的变化

4 结 论

本文研究了 D_2^+ 分子离子强场解离过程中电子局域化对激光波长的依赖关系. 结果表明, 电子局域化程度随着波长的增长有增强的趋势, 这与已有研究工作中红外波长能有效提高电子局域化控制的结论^[44,45]是一致的. 同时进一步发现了电子局域化随波长的细节变化, 即在某些波长下电子局域化程度会出现衰减. 这是由于不同振动态的电子

局域化对 CEP 的依赖并非完全一致, 在某些波长下甚至出现了反相抵消, 并导致了较弱的电子局域程度. 其物理原因则在于电子局域化是与电子运动和核运动同时相关联的, 但当波长发生变化时, 电子运动以及核运动对 CEP 的响应会出现不一致, 因此使不同振动态下的电子局域化产生相位移动, 最终导致了电子局域化随波长的不规则变化. 另外, 随着超快激光技术的发展, 人们已经能够为太赫兹脉冲的产生提供稳定、可靠的激光光源, 这也使得太赫兹辐射的应用得以蓬勃发展. 最近, 人们已经把电子局域化的控制方案拓展到了太赫兹波段^[48,49]. 虽然, 电子局域化程度有了很明显的提高, 但是其中的物理机制还不清楚. 所以, 在下一步的工作中, 我们将研究从中红外脉冲到太赫兹脉冲的强场解离过程中电子局域化随波长的变化规律, 进一步揭示太赫兹脉冲作用下的电子局域化的物理机制.

参考文献

- [1] Zewail A H 2000 *J. Phys. Chem. A* **104** 5660
- [2] Posthumus J H 2004 *Rep. Prog. Phys.* **67** 623
- [3] Bandrauk A D, Chelkowski S, Nguyen H S 2004 *Int. J. Quant. Chem.* **100** 834
- [4] Liu K L, Zhang Q B, Lan P F, Lu P X 2013 *Opt. Express* **21** 5107
- [5] Lan P F, Lu P X, Cao W, Li Y H, Wang X L 2007 *Phys. Rev. A* **76** 011402
- [6] Corkum P B, Krausz F 2007 *Nature Phys.* **3** 381
- [7] Krausz F, Ivanov M 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 163
- [8] Lan P F, Lu P X, Cao W, Wang X L, Hong W Y 2007 *Opt. Lett.* **32** 1186
- [9] Goulielmakis E, Schultze M, Hofstetter M, Yakovlev V S, Gagnon J, Uiberacker M, Aquila A L, Gullikson E M, Attwood D T, Kienberger R, Krausz F, Kleineberg U 2008 *Science* **320** 1614
- [10] Cao W, Lu P, Lan P, Wang X, Yang G 2006 *Phys. Rev. A* **74** 063821
- [11] Hong W Y, Lu P F, Cao W, Lan P, Wang X 2007 *J. Phys. B* **40** 2321
- [12] Weber T, Giessen H, Weckenbrock M, Urbasch G, Staudte A, Spielberger L, Jagutzki O, Mergel V, Vollmer M, Dörner R 2000 *Nature* **405** 658
- [13] Zhou Y M, Huang C, Liao Q, Lu P 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 053004
- [14] Kienberger R, Goulielmakis E, Uiberacker M, Baltuska A, Yakovlev V, Bammer F, Scrinzi A, Westerwalbesloh Th, Kleineberg U, Heinzmann U, Drescher M, Krausz F 2007 *Nature* **427** 817

- [15] Cao W, Lu P, Lan P, Wang X, Li Y 2007 *Phys. Rev. A* **75** 063423
- [16] Lan P F, Lu P X, Li F, Li Y, Yang Z 2008 *Opt. Express* **16** 5868
- [17] 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, 徐志展 2004 物理学报 **53** 2316]
- [18] Zhang Q B, Hong W Y, Lan P F, Yang Z Y, Lu P X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 7848 (in Chinese) [张庆斌, 洪伟毅, 兰鹏飞, 杨振宇, 陆培祥 2008 物理学报 **57** 7848]
- [19] Wang S Y, Hong W Y, Zhang Q B, Li Q G, Lu P X 2010 *Chin. Phys. B* **19** 083203
- [20] Luo L Y, Du H C, Hu B T 2012 *Chin. Phys. B* **21** 033202
- [21] Cavalieri A L, Müller N, Uphues T, Yakovlev V S, Baltuška A, Horvath B, Schmidt B, Blümel L, Holzwarth R, Hendel S, Drescher M, Kleineberg U, Echenique P M, Kienberger R, Krausz F, Heinzmann U 2007 *Nature* **449** 1029
- [22] Zhu X S, Zhang Q B, Hong W Y, Lu P X, Xu Z Z 2011 *Opt. Express* **19** 24198
- [23] Wang J, Liu F, Yue D G, Zhao J, Xu Y, Meng Q T, Liu W K 2012 *Chin. Phys. B* **21** 123301
- [24] Yue D G, Zheng X Y, Liu H, Wang C X, Meng Q T 2009 *Chin. Phys. B* **18** 1479
- [25] Liu K L, Zhang Q B, Lu P X 2012 *Phys. Rev. A* **86** 033410
- [26] Madsen C B, Anis F, Madsen L B, Esry B D 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 163003
- [27] Kling M F, Siedschlag C, Verhoef A J, Khan J I, Schultze M, Uphues T, Ni Y, Uiberacker M, Drescher M, Krausz F, Vrakking M J 2006 *Science* **312** 246
- [28] He F, Ruiz C, Becker A 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 083002
- [29] Kremer M, Fischer B, Feuerstein B, de Jesus V L B, Sharma V, Hofrichter C, Rudenko A, Thumm U, Schröter C D, Moshhammer R, Ullrich J 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 213003
- [30] Kling N G, Betsch K J, Zohrabi M, Zeng S, Anis F, Ablikim U, Jochim B, Wang Z, Kübel M, Kling M F, Carnes K D, Esry B D, Ben-Itzhak I 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 163004
- [31] Liu K L, Hong W Y, Lu P F 2011 *Opt. Express* **19** 20279
- [32] Znakovskaya I, von den Hoff P, Zherebtsov S, Wirth A, Herrwerth O, Vrakking M, de Vivie-Riedle R, Kling M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 103002
- [33] Lan P F, Lu P X, Cao W, Li Y H, Wang X L 2007 *Phys. Rev. A* **76** 021801
- [34] Takemoto N, Becker A 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 203004
- [35] Zhang Q B, Lu P X, Lan P F, Hong W Y, Yang Z 2008 *Opt. Express* **16** 9795
- [36] Hong W Y, Lu P X, Lan P F, Zhang Q B, Wang X L 2009 *Opt. Express* **17** 5139
- [37] Hong W Y, Lu P X, Lan P F, Yang Z, Li Y H, Liao Q 2008 *Phys. Rev. A* **77** 033410
- [38] Magrakvelidze M, He F, Niederhausen T, Litvinyuk I V, Thumm U 2009 *Phys. Rev. A* **79** 033410
- [39] Silva F, Austin D R, Thai A, Baudisch M, Hemmer M, Faccio D, Couairon A, Biegert J 2012 *Nature Comm.* **3** 807
- [40] Hong Z F, Zhang Q B, Lu P X 2013 *Opt. Express* **21** 9491
- [41] Lan P F, Lu P X, Li Q, Li F, Hong W Y, Zhang Q 2009 *Phys. Rev. A* **79** 043413
- [42] Tate J, Auguste T, Muller H G, Salières P, Agostini P, DiMauro L F 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 013901
- [43] Hong W Y, Lu P F, Li Q, Zhang Q B 2009 *Opt. Lett.* **34** 2102
- [44] Liu K L, Hong W Y, Zhang Q B, Lu P X 2011 *Opt. Express* **19** 26359
- [45] Znakovskaya I, von den Hoff P, Marcus G, Zherebtsov S, Bergues B, Gu X, Deng Y, Vrakking M J J, Kienberger R, Krausz F, de Vivie-Riedle R, Kling M F 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 063002
- [46] Liao Q, Zhou Y M, Huang C, Lu P X 2012 *New J. Phys.* **14** 013001
- [47] Kelkensberg F, Sansone G, Ivanov M Y, Vrakking M 2011 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** 8647
- [48] Jia Z M, Zeng Z N, Li R X, Xu Z Z, Deng Y P 2014 *Phys. Rev. A* **89** 023419
- [49] Xu T Y, He F 2013 *Phys. Rev. A* **88** 043426

Non linear wavelength dependence of electron localization in strong-field dissociation of D_2^+ *

Ji Ling-Ling[†] Tong Ming-Qiang Wang Yu-Hua

(Department of Applied Physics, Wuhan University of Science and Technology, Wuhan 430081, China)

(Received 5 January 2014; revised manuscript received 7 May 2014)

Abstract

The wavelength dependence of the electron localization in dissociating molecular ion D_2^+ is investigated via solving the time-dependent Schrödinger equation of the two-state model of the molecular ion. Our results reveal an anomalous dependence of the electron localization on the laser wavelength. Overall, the degree of the electron localization shows a growing trend with the increase of wavelength, but it drops off obviously at some wavelengths. It is found that the localization asymmetries for some vibrational states become opposite in phase when the wavelength is changed, leading to the decline of the electron localization. Further analysis shows that the nuclear and electronic motions that determine the electron localization respond inconsistently to the variation of the wavelength, ultimately resulting in the non-linear dependence of the electron localization on the laser wavelength.

Keywords: molecular dissociation, electron localization, strong-field dynamics

PACS: 03.65.-w, 82.37.Vb, 87.15.mk

DOI: [10.7498/aps.63.180301](https://doi.org/10.7498/aps.63.180301)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10904120).

† Corresponding author. E-mail: jilingling@wust.edu.cn