

强场隧穿电离模式下的氦原子电离时间问题研究

王艳海

Ionization time of He atom in the strong field tunnelling ionization mode

Wang Yan-Hai

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 153201 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.153201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.153201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I15>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

1.5 μm 光通信波段明亮压缩态光场的产生及其 Wigner 函数的重构

Generation of bright squeezed light at 1.5 μm telecommunication band and its Wigner function reconstruction

物理学报.2016, 65(4): 044203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.044203>

碱金属原子的光激发与光电离

Photoexcitation and photoionization of alkali atoms

物理学报.2015, 64(13): 133201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.133201>

原子系统中远失谐脉冲光束对的群速度操控

Group velocity manipulation of far off-resonant pulse-pair in atomic system

物理学报.2015, 64(9): 094208 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.094208>

循环跃迁的 Δ 型三能级系统中的无反转激光

Laser without inversion in a Δ -configuration three-level system with cyclic transition

物理学报.2012, 61(14): 144205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.144205>

高空核爆炸下大气的 X 射线电离及演化过程数值模拟

Numerical simulation of X-ray ionization and atmospheric temporal evolutions with high-altitude nuclear explosions

物理学报.2012, 61(8): 083201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.083201>

强场隧穿电离模式下的氦原子电离时间问题研究*

王艳海†

(河北科技大学理学院, 石家庄 050018)

(2016年4月24日收到; 2016年5月27日收到修改稿)

电子隧穿电离动力学在阿秒物理学领域具有极为重要的作用, 电子隧穿电离时间是该领域的最基本问题之一, 在理论和实验上仍然存在着广泛的争议. 本文通过数值求解含时薛定谔方程, 计算了阶跃强激光场作用下He原子中单电子隧穿电离时间, 计算结果表明电子隧穿合成势垒的最大概率流密度时间和基态波函数演化到连续态的时间与Keldysh时间非常接近. 讨论了电子隧穿时间为什么不能定义为最大电离率和激光峰值之间的延时的原因. 相比其他文献给出的隧穿时间定义, 基态波函数演化到连续态的时间与实际电离过程更为相符, 将该时间定义为电子隧穿合成势垒的时间更为确切. 根据本文的分析结果, 提出了采用光场合成技术测量电子实际的隧穿电离时间的实验方案.

关键词: 隧穿电离, 阿秒物理学, 隧穿时间, 瞬态光场合成

PACS: 32.80.-t, 42.50.CT, 42.50.Hz

DOI: 10.7498/aps.65.153201

1 引言

MacColl在1932年研究了能量小于势垒的粒子从势垒中隧穿的时间问题^[1], 自此, 如何定义和测量粒子隧穿势垒的时间一直成为研究的热点问题^[2-11]. 随着超强超短激光技术的发展, 电子隧穿势垒和强场激光相结合, 导致了在强场作用下原子中的电子隧穿电离时间问题的研究, 即原子中处在库仑场束缚下的电子在强激光电场作用下从库仑势阱和激光电场电势的合成势垒中的隧穿时间. 隧穿电离动力学在阿秒物理学领域中起着极为重要的作用, 电子隧穿电离时间涉及到原子核外电子被电离后的重新排布问题、量子路径控制、高次谐波过程中的干涉效应、分子轨道动力学等问题^[12-15], 因此, 电子隧穿电离问题的研究将为上述研究领域提供理论基础和技术支撑.

阿秒科学技术的进展开启了测量激光场电离原子分子的时间问题, 已经可以采用激光电场操控电子对再碰撞物理学和电离动力学问题在阿秒

尺度上进行研究, 新的实验测量技术, 诸如阿秒取样^[16]、高次谐波光谱^[9]、阿秒瞬态吸收^[17]和阿秒时钟等^[7]技术, 可以实现达到数十阿秒量级的时间分辨率. Keller等^[7,18]采用阿秒时钟技术率先从实验上对电子隧穿原子势垒的时间进行了研究, Landsman和Keller^[19]综述了电子隧穿电离的时间问题, 并对隧穿时间的几种定义进行了比较, 发现拉莫尔时间和采用费曼路径积分(Feynman path integral, FPI)计算的时间和他们的实验数据比较一致, 尤其是FPI时间与实验测量更相符合, 得到了隧穿延时为数十阿秒的结论. Safir等^[9]研究了双色场作用下高次谐波产生过程中的电离和隧穿时间问题, 得到了电离和再碰撞时间为数百阿秒的结果, 这与Zhao等^[20]的研究结果一致, 而与Keller等的研究结果不相符合. 尽管在隧穿电离的问题上理论和实验研究都取得了很大的进展, 但对于隧穿时间的定义和实验数据的解释上仍然缺乏一致性. 例如, Keller和Landsman等将隧穿时间延时定义为电子获得最大电离率和激光峰值电场对应的时间差, 而对于数个循环周期的激光电场,

* 国家自然科学基金(批准号: 11504081)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wangyanhai@hotmail.com

电子可能在任意一个循环周期内隧穿势垒, 况且峰值电场一定对应最大电离率的判断也很值得探究.

本文采用传统量子力学波函数和概率分布等概念对电子隧穿电离动力学问题进行研究, 数值求解含时薛定谔方程, 计算强场作用下原子中的电子隧穿电离时间, 希望本文的研究结果能够澄清上述疑问, 并对如何设计合适的实验来测量电子隧穿势垒的时间问题有所帮助.

2 强场激光与原子作用的理论模型和数值模拟

2.1 理论模型

用于电子隧穿电离的激光电场波长通常远大于电子波函数在空间上扩展的尺度, 采用偶极近似可以推导出长度规范下单电子作用的一维含时薛定谔方程(本文采用原子单位制, atomic units, a.u.).

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

其中是 $V(x)$ 原子库仑势, $E(t)$ 是驱动激光电场. 强场激光作用下原子中电子动力学行为, 可以看作是原子在库仑势场和激光电场联合作用下的波包随时间的演化问题, 电子的波函数包含了动力学的全部信息. 采用软核库仑势^[21]和虚时演化算法^[22,23]计算原子基态波函数, 劈裂算符方法^[24]数值计算含时薛定谔方程. 有效软核库仑势可以表示为

$$V(Z, \alpha, x) = \frac{-Z}{\sqrt{x^2 + \alpha(Z)}}, \quad (2)$$

其中 Z 为有效电荷数, $\alpha = 2/Z^2$ 为软核参数, 本文主要针对氦原子进行研究, 则相应的参数为 $Z = 1.345$, $\alpha = 0.5$, 对应 He 原子的第一电离能为 24.58 eV. 有效软核势如图 1 所示, 图中虚线为 He 原子有效软核库仑势, 激光电场线性势扭曲了库仑势, 形成了一个接近三角形的合成势垒, 对应图中红色实线, He 原子中的一个电子可以隧穿该势垒, x_{in} 对应势垒入口, x_{ex} 为势垒出口, 由下式计算

$$V(Z, \alpha, x) - xE = -I_p. \quad (3)$$

由劈裂算符法计算出随时间演化的波函数 $\psi(x, t)$, 势垒出口处的电子概率流密度 $j(x_{ex}, t)$, 根据电子流密度达到最大值的时间, 可以确定电子

隧穿出势垒的时间 τ_A ^[25]. 电子的隧穿电离时间也可以由下式计算^[26]:

$$\langle \tau \rangle = \frac{\langle \psi(x, t=0) | \tau | \psi(x_{ex}, t) \rangle}{\langle \psi(x, t=0) | \psi(x_{ex}, t) \rangle}, \quad (4)$$

其中 $\psi(x, t=0)$ 氦原子基态波函数, 可以看作是入射波函数; $\psi(x_{ex}, t)$ 为势垒出口处的波函数, 即透射波函数; 积分的上下限分别为 τ_A 和 τ_0 , 其中 τ_0 为电场开始作用在原子上的时间, τ_A 在这里定义为势垒出口处的概率流密度取最大值时对应的的时间, 显然这一时间对应电子隧穿出势垒的一种平均值. 计算结果 $\langle \tau \rangle$ 为复变量^[19,27], 其实部和虚部为

$$\langle \tau \rangle = \tau_r - i\tau_i. \quad (5)$$

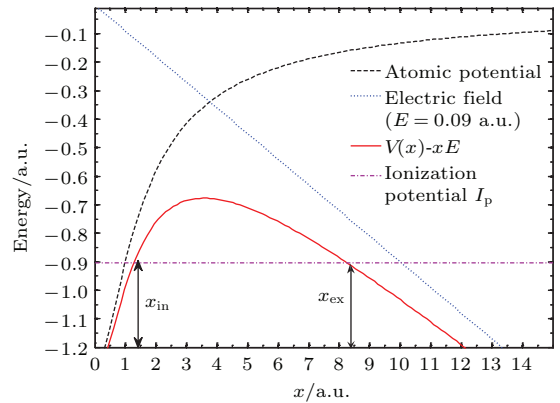


图 1 (网刊彩色) He 原子的势能曲线(均采用原子单位制) 虚线为有效软核库仑势曲线, 点线为激光电场附加线性势, 实线为合成势能曲线(势垒), 点划线为电离势能
Fig. 1. (color online) Graphic displays of the He atomic potential curves (atomic units adopted). Dashed line, the effective soft Coulomb potential curve; dotted line, the linear potential of the laser electric field; solid line, the synthetic potential; dash-dotted line, the ionization potential energy curve.

2.2 He 原子中单电子隧穿时间的数值计算

本文主要针对 He 原子在阶跃强场激光作用下电子的隧穿问题进行研究, 电场峰值强度介于 0.04—0.12 a.u. 之间, 对应光强为 0.73—5.6 $\times 10^{14}$ W/cm², 判断电离过程为多光子电离还是隧穿电离的 Keldysh 参量为 $\gamma = \omega \sqrt{2I_p}/E_0$ ^[2], 对应本文的取值范围为 0.4—2.0, 由此可以判断隧穿电离为主要电离过程^[28].

采用虚时演化法计算的 He 原子的基态波函数如图 2 所示, 对应 He 原子基态能量 $I_p = -24.58$ eV, 虚线为 $[V(x) + 1]$ (+1 是为了方便观察). 采用单电子近似, 应用劈裂算符方法计算, 当

所加阶跃电场强度为 $F = 0.09$ a.u. 时, 波函数随时间的演化如图 3 所示, 红色虚线对应 $t = 30$ a.u., 蓝色点线对应 $t = 50$ a.u., 黑色实线对应 $t = 100$ a.u., 表明在激光场的作用下波函数从基态向势垒外的演化. 电子在合成势(库仑势和激光电场线性势)的势垒入口和出口处波函数随时间的分布, 如图 4 所示, 实线为势垒出口处的波函数 $\psi(x_{\text{ex}}, t)$, 虚线为势垒入口处的波函数 $\psi(x_{\text{in}}, t)$, 当 $t > 30$ a.u. 时, 从时间上考虑波函数逐渐转化为平面波, 原来处于束缚态的电子将逐渐转变为连续态的自由电子. 合成势垒入口和出口处电子的概率流密度随时间的分布见图 5, 虚线为势垒入口处的流密度 $j(x_{\text{in}}, t)$, 随时间分布出现负值说明此处电子有一定的概率反射回原子势阱, 实线为势垒出口处的流密度 $j(x_{\text{ex}}, t)$, 随时间分布没有出现负值, 这说明电子完全隧穿出势垒, 经过此处后, 电子不再反射回势垒, 其峰值则对应电子隧穿出势垒的时间 τ_A . 阶跃电场为其他值时的相关计算与上述过程相同.

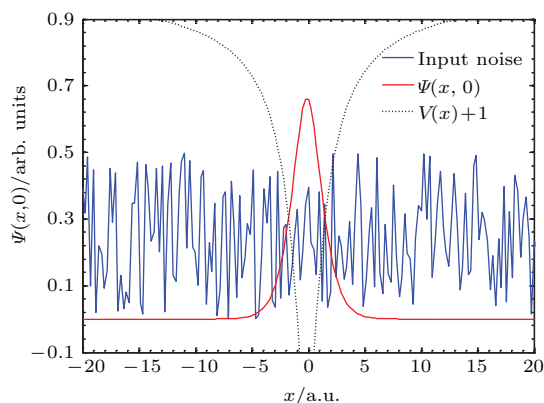


图 2 He 原子基态波函数分布

Fig. 2. The wave function of He atom in the ground state.

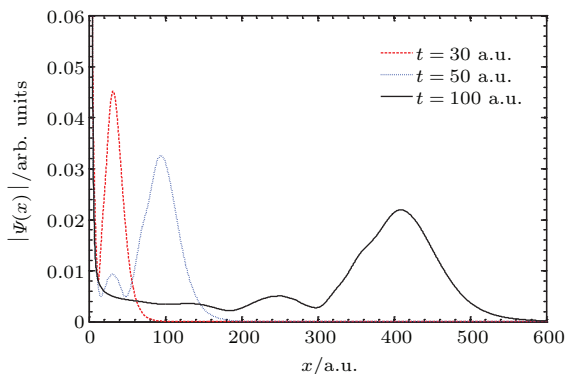


图 3 (网刊彩色) 不同时刻波函数的幅度分布

Fig. 3. (color online) The Magnitude of $\psi(x)$ for different times.

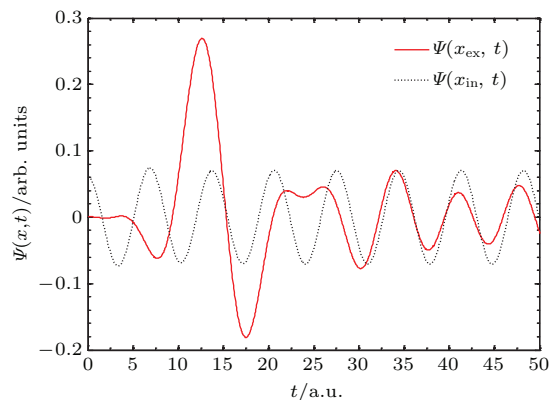


图 4 (网刊彩色) 电子在势垒入口和出口处的波函数

Fig. 4. (color online) The wave function at the entrance and exit of the barrier.

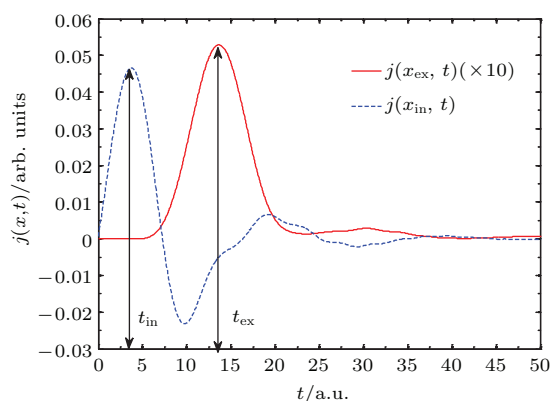


图 5 (网刊彩色) 势垒入口和出口处概率流密度分布

Fig. 5. (color online) The probability current at the entrance and exit of the barrier.

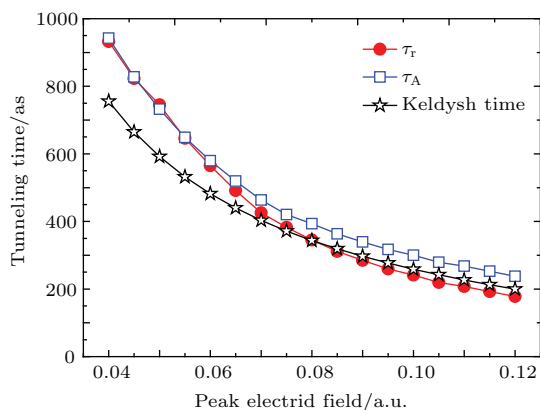


图 6 (网刊彩色) 强场作用下 He 原子中单电子的隧穿电离时间

Fig. 6. (color online) Tunneling time of single electron in He under a strong laser field.

由以上分析确定势垒出口处的波函数 $\psi(x_{\text{ex}}, t)$ 、从势垒中隧穿出来的时间 τ_A , 根据 (4) 式可以计算出 He 原子中的电子在阶跃强激光场的作用下电子的电离时间, 计算结果如

图6所示, τ_A 为势垒出口处的电子概率流密度达到最大值的时间, τ_r 则是根据(4)和(5)式计算出来的实部时间, 图中还给出了Keldysh时间, $\tau_K = |x_{ex} - x_{in}| / \sqrt{I_p/2}$ [2,29].

3 计算结果及讨论

He原子中的单电子隧穿电离时间的计算结果如图6所示, 电子从库仑势和激光线性势的合成势垒中隧穿电离, 隧穿电离时间为电子隧穿出势垒的时间减去激光电场开始作用的时间, 即He原子中单电子从基态演变到连续态的时间延时. 在本文设定的电场强度下, 隧穿时间在数百阿秒量级, Keldysh时间 τ_K 可以看作基态波函数在势垒中演化出隧穿电离所需的波函数分量的时间尺度, 隧穿电离的概率流密度时间 τ_A 大于Keldysh时间, $\tau_A \approx 1.25\tau_K$, 因此 τ_K 可以视为隧穿电离时间的一般下限. 根据(4)和(5)式计算出的实部时间 τ_r 在光电场较弱时与 τ_A 非常接近, 当光电场较强时 τ_r 逐渐靠近直至小于 τ_K , 说明电子从激光场中汲取了能量, 电子速度的期望值将大于 $\sqrt{I_p/2}$, 因此在激光电场较强时, 隧穿时间将小于 τ_K , 这也表明电子隧穿出势垒时获得的最终速度将随着激光电场的增强而变大. 由于本文计算时采用的是阶跃电场, 因此 τ_r 给出了电子隧穿电离时间的下限, 若采用随时间振荡的激光电场, 则电子隧穿势垒所需的时间将会更长.

文献[7, 18, 30]将隧穿时间定义为最大电离率和激光电场峰值之间的延时, 采用时间宽度为5—7 fs (包含2—3个振荡周期)的椭圆偏振激光脉冲来测量He原子单电子隧穿电离时间, 并经过复杂的计算给出了隧穿延时为数十阿秒量级, 与本文的计算结果相差很大. 原因在于文献作者认为峰值电场对应最大电离率, 这一点值得推敲, 因为隧穿电离可能在光电场的任意时刻发生, 峰值前的光电场已经开始电离原子, 基态波函数逐渐被抽空, 峰值电场来到之前, 隧穿电离率可能已经达到最大值, 峰值电场实际上对隧穿电离并没有太大的作用, 因此, 文献中的隧穿延时并不是实际的电子隧穿时间, 从而掩盖了实际的隧穿电离动力学过程.

基于以上分析, 测量实际的电子隧穿势垒的时间, 可以采用单个周期甚至更窄的正弦或阶跃光电场, 这样的实验条件已经基本具备, 如此短的光电

场可以采用光场合成技术实现 [31,32], 但无论采用什么样的光电场, 电子隧穿时间定义为最大电离率和激光电场峰值之间的延时都是不恰当的.

4 结 论

本文通过数值计算含时薛定谔方程, 研究了原子在阶跃强场激光作用下的隧穿电离动力学问题, 计算了电子隧穿势垒的概率流密度时间、隧穿波函数和基态波函数的跃迁时间, 计算结果与Keldysh时间相符合, 而与阿秒时钟技术的测量结果相差非常大. 本文定义电子隧穿电离时间可以视作原子基态波函数对外界驱动电场变化而演变的响应时间, 该时间为基态波函数在强场作用下在势垒中演化出隧穿电离分量所需的波函数分量的时间尺度, 因此, 隧穿时间可以看作电子基态波函数在外激光电场和库仑势场的双重作用下, 演化出对应最大隧穿电离率的波函数成分所需的时间. 由于电子可能在光电场作用的任意时刻隧穿电离, 呈现概率性分布, 激光峰值到来之前隧穿电离过程已经触发, 原子中电子的基态波函数逐渐被抽空, 电离率可能已经达到最大值, 也就是说隧穿电离率未必对应激光峰值电场, 原子电离过程对激光峰值电场的响应未必是线性的, 也可能是非线性的, 这一问题尚需进行深入的研究, 因此, 阿秒时钟技术定义的隧穿延时掩盖了实际的隧穿动力学过程, 并不是实际的电子隧穿电离时间. 根据本文的研究结果, 提出了采用光电场合成技术得到的瞬态阶跃或正弦光电场来测量电子实际隧穿电离时间的实验方案.

参考文献

- [1] Maccoll L A 1932 *Phys. Rev.* **40** 621
- [2] Keldysh L 1965 *Sov. Phys. JETP* **20** 1307
- [3] Perelomov A, Popov V, Terent'ev M 1966 *Sov. Phys. JETP* **23** 924
- [4] Büttiker M, Landauer R 1985 *Phys. Scr.* **49** 711
- [5] Landauer R, Martin T 1994 *Rev. Mod. Phys.* **66** 217
- [6] Yamada N 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 170401
- [7] Eckle P, Pfeiffer A, Cirelli C, Staudte A, Dörner R, Müller H, Büttiker M, Keller U 2008 *Science* **322** 1525
- [8] Pfeiffer A N, Cirelli C, Smolarski M, Dimitrovski D, Abu-Samaha M, Madsen L B, Keller U 2011 *Nature Phys.* **8** 76
- [9] Shafir D, Soifer H, Bruner B D, Dagan M, Mairesse Y, Patchkovskii S, Ivanov M Y, Smirnova O, Dudovich N. 2012 *Nature* **485** 343

- [10] Mcdonald C R, Orlando G, Vampa G, Brabec T 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 090405
- [11] Hassan M T, Luu T, Moulet A, Raskazovskaya O, Zhokhov P, Garg M, Karpowicz N, Zheltikov A, Pervak V, Krausz F 2016 *Nature* **530** 66
- [12] Krausz F, Ivanov M 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 163
- [13] Corkum P B 2011 *Phys. Today* **64** 36
- [14] Luo X Y, Liu H F, Ben S, Liu X S 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 123201 (in Chinese) [罗香怡, 刘海凤, 贲帅, 刘学深 2016 物理学报 **65** 123201]
- [15] Liu Y, Jia C, Guo F M, Yang Y J 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 033201 (in Chinese) [刘艳, 贾成, 郭福明, 杨玉军 2016 物理学报 **65** 033201]
- [16] Schultze M, Fieß M, Karpowicz N, Gagnon J, Korbman M, Hofstetter M, Neppel S, Cavalieri A L, Komninos Y, Mercurius T 2010 *Science* **328** 1658
- [17] Goulielmakis E, Loh Z H, Wirth A, Santra R, Rohringer N, Yakovlev V S, Zherebtsov S, Pfeifer T, Azzeer A M, Kling M F 2010 *Nature* **466** 739
- [18] Gallmann L, Landsman A, Weger M, Maurer J, Boge R, Ludwig A, Heuser S, Cirelli C, Keller U 2013 *Conference on and International Quantum Electronics Conference* San Jose, California, United States, June 9–14, 2013 p1
- [19] Landsman A S, Keller U 2015 *Phys. Rep.* **547** 1
- [20] Zhao J, Lein M 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 043901
- [21] Su Q, Eberly J H 1991 *Phys. Rev. A* **44** 5997
- [22] Lehtovaara L, Toivanen J, Eloranta J 2007 *J. Comput. Phys.* **221** 148
- [23] Zhang G T 2011 *Ph. D. Dissertation* (Jilin: Jilin University) (in Chinese) [张刚台 2011 博士学位论文 (吉林: 吉林大学)]
- [24] Feit M, Fleck J, Steiger A 1982 *J. Comput. Phys.* **47** 412
- [25] Teeny N, Yakaboylu E, Bauke H, Keitel C H 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 063003
- [26] Feynman R P, Hibbs A R (Translated by Zhang B G) 1986 *Quantum Mechanics and Path Integrals* (Beijing: Science Press) pp171–178 (in Chinese) [费曼, 希布斯 著 (张邦固 译) 1986 量子力学与路径积分 (北京: 科学出版社) 第171—178页]
- [27] Landsman A S, Keller U 2014 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47** 204024
- [28] Yudin G L, Ivanov M Y 2001 *Phys. Rev. A* **64** 289
- [29] Orlando G, Mcdonald C R, Protik N H, Vampa G, Brabec T 2014 *J. Phys. B: At., Mol. Opt. Phys.* **47** 44
- [30] Pfeiffer A N, Cirelli C, Smolarski M, Keller U 2013 *Chem. Phys.* **414** 84
- [31] Wirth A, Hassan M T, Grguraš I, Gagnon J, Moulet A, Luu T, Pabst S, Santra R, Alahmed Z, Azzeer A 2011 *Science* **334** 195
- [32] Hassan M T, Wirth A, Grguras I, Moulet A, Luu T, Gagnon J, Pervak V, Goulielmakis E 2012 *Rev. Sci. Instrum.* **83** 111301

Ionization time of He atom in the strong field tunnelling ionization mode*

Wang Yan-Hai[†]

(School of Science, Hebei University of Science and Technology, Shijiazhuang 050018, China)

(Received 24 April 2016; revised manuscript received 27 May 2016)

Abstract

The question of how long it takes for a particle to tunnel through a barrier, which was first put forward by MacColl (*Phys. Rev.* **40** 621 (1932)), belongs to the fundamental process of quantum physics and has been the subject of intense debate since then. Many efforts have been devoted to addressing this question about how to define, explain and measure this tunneling time, but widespread controversies still exist in theories and experiments. Attosecond physics offers insights into ultrafast electron dynamics in atoms and molecules on the attosecond (10^{-18} s) timescales, and therefore, ionization of atoms or molecules in a strong laser field allows for tackling this question in an experimentally and conceptually well-defined manner. The tunneling ionization dynamics of electrons plays an extremely important role in the field, since tunneling is the first crucial step in strong field ionizations of atoms and molecules and underlies virtually all present experiments in attosecond science. In the present paper, the tunneling ionization time of a single-active electron tunneling through a He atom subjected to a step static electric field, defined as a nonvanishing positive time delay between the instant of switch-on of the step static electric field and the one of ionization, is obtained from the numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation in one dimension. The results show that the time delay between the instant of maximum probability current at the potential barrier exit and the one of switch-on of the step static electric field and the time delay needed by the ground wave function evolving to the continuum, which can be expressed as the transition element of the incident and transmitted parts of the wave function, are both very close to the Keldysh time explained as the time it takes for the bound electron having velocity $v = i\sqrt{I_p/2}$ to cross the tunneling barrier. Compared with the definition of tunneling time delay in other literature, the one of the ground wave function evolution to the continuous state is much consistent with the actual ionization process. The reason why the electron tunneling time cannot be defined as the time delay between the maximum ionization rate and the instant of the laser peak field is that the wave function could penetrate the tunneling barrier earlier if a few-cycle optical field is adopted in experiment. According to the analysis in this article, an experimental method of measuring the actual electron tunneling ionization time using the optical field synthesis technique is proposed. The results of this paper will be helpful in tackling the problem of tunneling time in strong ionization.

Keywords: tunnel ionization, attosecond physics, tunnel time delay, synthesis of light transients

PACS: 32.80.-t, 42.50.CT, 42.50.Hz

DOI: 10.7498/aps.65.153201

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11504081).

† Corresponding author. E-mail: wangyanhai@hotmail.com