

$H_2^+$  在强激光脉冲作用下的电离率和原子核间距的关系

俞祖卿 杨魏吉 何峰

Internuclear-distance-dependent ionization of  $H_2^+$  in strong laser field in a classical perspective

Yu Zu-Qing Yang Wei-Ji He Feng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 204202 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.204202

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.204202>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I20>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

非均匀激光场中氢分子离子高次谐波的增强

Enhancement of high-order harmonic generation from  $H_2^+$  in near plasmon-enhanced laser field

物理学报.2016, 65(12): 123201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.123201>

红外激光场中共振结构原子对极紫外光脉冲的压缩效应

Compression of extreme ultraviolet pulse for atom with resonant structure exposed to an infrared laser field

物理学报.2016, 65(10): 103202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.103202>

调制激光场中 Rydberg 原子的电磁感应透明

Electromagnetically induced transparency of Rydberg atoms in modulated laser fields

物理学报.2016, 65(10): 103201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.103201>

利用强场多光子电离技术实现对多原子分子离子振动量子态的光学操控

Optical control of the vibrational excitation of the polyatomic ions via strong field multi-photon ionization

物理学报.2014, 63(24): 244208 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.244208>

少周期激光脉冲与气体作用产生的离化电流和 THz 波辐射

Ionization currents and terahertz emission from the interaction of few-cycle laser pulses with gas targets

物理学报.2012, 61(17): 174205 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.174205>

# $H_2^+$ 在强激光脉冲作用下的电离率和原子核间距的关系\*

俞祖卿 杨魏吉 何峰†

(上海交通大学物理与天文系, 激光等离子体教育部重点实验室, IFSA 协同创新中心, 上海 200240)

(2016年6月6日收到; 2016年6月27日收到修改稿)

本文利用蒙特卡罗方法模拟电子在激光场以及分子库仑势作用下的经典轨迹, 研究了氢分子离子  $H_2^+$  的电离率和原子核间距的关系, 为电荷共振电离增强现象提供了一种基于电子经典运动的解释. 当原子核间距为 5—6 a.u. 时,  $H_2^+$  的电离率显著增大. 电子的运动轨迹揭示此时电子先围绕其中一个原子核运动, 在逐步获得越来越多的动能后, 运动轨迹受到另一个原子核的强烈影响, 最后电子逃逸原子核的束缚. 原子核之间的库仑势垒和激光调制的库仑势垒的高度差与电离率的大小直接相关.

**关键词:** 电子轨迹, 氢分子离子, 强激光脉冲, 电离增强

**PACS:** 42.50.Hz, 32.80.Rm, 42.65.Re

**DOI:** 10.7498/aps.65.204202

## 1 引言

超短强激光脉冲的出现极大地推动了激光与物质相互作用的研究<sup>[1]</sup>. 超短激光脉冲作为一种时间分辨率极高的工具可以用来捕捉和控制发生在原子或者分子内部的超快动力学过程, 例如高次谐波的产生<sup>[2,3]</sup>、分子的振动和旋转<sup>[4,5]</sup>、原子和分子的电离<sup>[6]</sup>以及分子的解离<sup>[7–11]</sup>等. 在过去的几十年内, 人们对原子和分子的电离现象获得了越来越深刻的认识, 从爱因斯坦提出的光电效应, 到多光子电离<sup>[12]</sup>、隧穿电离<sup>[13]</sup>以及阈上电离<sup>[14,15]</sup>, 都已经可以在实验上观测并控制. 作为自然界最简单的分子, 氢分子离子的电离引起了广泛的关注. 1995年, Zuo和Bandrauk<sup>[16]</sup>在数值模拟中发现了电荷共振增强现象. 研究发现, 当原子核距离为6和10 a.u.时, 氢分子离子的电离率出现了两个电离增强峰. 在其后开展的一系列实验研究中, 人们普遍观察到了一个电离增强峰<sup>[17,18]</sup>. 最近, 澳大利亚的Xu等<sup>[19]</sup>利用两束周期量级的飞秒激光

脉冲研究了氢分子离子的电荷共振电离增强过程, 通过精确调节两束激光脉冲的强度, 实验室首次观测到了两个电离峰值. 2015年, Xin等<sup>[20]</sup>发现在电离增强最明显的时候,  $H_2^+$  电离出的电子动量在垂直于激光偏振平面内呈现了夫琅禾费衍射的图像. 电荷共振电离增强不光发生在  $H_2^+$  中, 研究发现在更复杂的分子中, 例如  $H_2O$ <sup>[21]</sup>,  $CO_2$ <sup>[22]</sup> 等也呈现了电离增强现象. Lötstedt等<sup>[23]</sup>理论预测乙炔在强激光场作用下也会出现电离增强. 然而, 对于电荷共振电离现象的理解却存在着几种不同的观点. Zuo和Bandrauk<sup>[16]</sup>研究发现第一个电离增强峰(出现在原子核间距为6 a.u.左右)主要是电子在激光场作用下处于基态和第一激发态的叠加态, 使得电子局域在其中的某一个原子核上, 这种电子分布对称性的破坏导致了电离率的增加. 第二个电离增强峰(出现在原子核间距为10 a.u.左右)是由于当原子核间距很大时, 基态和第一激发态可以强烈耦合, 从而使得电子处于第一激发态的几率约占50%, 且第一激发态的能级高于原子核之间的库仑势垒, 从而第一激发态很不稳定, 可以很快电

\* 国家自然科学基金(批准号: 11322438, 11574205)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: fhe@sjtu.edu.cn

离. 这种解释方案从本质上来讲是一种阈上电离的机制. Xi 和 Chu<sup>[24]</sup> 认为电离增强源自于  $H_2^+$  从基态到第一激发态的多光子共振跃迁, 电离增强峰出现的位置具体依赖于激光的强度和频率以及电子结构. 但是 Plummer 和 McCann<sup>[25]</sup> 质疑了电子局域化以及阈上电离导致的电离增强的解释. 后来, Tsogbayar 和 Horbatsch<sup>[26]</sup> 提出处于激发态的电子电离时不必沿着分子轴和激光场的方向, 电子可以从侧向散射出去, 这种侧向散射对电离增强效应具有重要的贡献. 以前的研究主要是利用数值模拟含时薛定谔方程的方法研究了电离率和原子核间距的关系<sup>[16,24–26]</sup>. 这一方法计算结果精确, 但物理图像不是非常直观. 除了高精度的量子计算方法外, 经典的蒙特卡罗模拟方法也受到了关注. 这一方法不能定量解释原子分子内部的很多物理过程, 但有时候非常有利于凝练出物理图像. 比如人们用经典方法研究高频场中原子的稳定化<sup>[27,28]</sup>, 高频场中 Coulomb 爆炸<sup>[29]</sup>, 激光场中一维氢分子离子的动力学行为<sup>[30]</sup>, 高次谐波的产生<sup>[30–32]</sup>, 研究阈上电离和阈上解离理论<sup>[33]</sup> 等. 在经典的蒙特卡罗模拟中沿用费曼路径积分加入相位, 可以研究电离过程中的干涉结构<sup>[34]</sup>. 本文利用蒙特卡罗数值模拟方法计算  $H_2^+$  中的电子在激光场作用下的运动轨迹, 给出直观的电离增强效应的直观物理图像.

## 2 理论模型

$H_2^+$  的 Hamilton 量可表示如下 (除非特殊标注, 本文使用原子单位制)

$$\begin{aligned}
 H(x, y, z, p_x, p_y, p_z, t) &= \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \frac{p_z^2}{2} + \frac{1}{R} \\
 &+ V_e(x, y, z, R) + x \cdot E(t), \quad (1)
 \end{aligned}$$

式中  $x, y, z$  表示电子坐标,  $p_x, p_y, p_z$  表示电子的动量,  $R$  表示核间距,  $V_e$  为电子和原子核相互作用的库仑势,  $E(t)$  是单色激光脉冲. 在周期激光脉冲作用下的这一超短过程, 原子核由于惯性太大而运动很慢, 因此我们忽略了电离过程中原子核的运动. 电子和原子核相互作用库仑势描述为<sup>[35]</sup>

$$\begin{aligned}
 V_e(x, y, z) &= -\frac{1}{\sqrt{(x - \frac{R}{2})^2 + y^2 + z^2 + q_e}}
 \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{\sqrt{(x + R/2)^2 + y^2 + z^2 + q_e}}, \quad (2)$$

其中取软核系数  $q_e = 0.06$ . 这一体系的 Hamilton 正则方程为:

$$\frac{dp_x}{dt} = -E(t) - \frac{\partial V_e}{\partial x}, \quad (3)$$

$$\frac{dp_y}{dt} = -\frac{\partial V_e}{\partial y}, \quad (4)$$

$$\frac{dp_z}{dt} = -\frac{\partial V_e}{\partial z}, \quad (5)$$

其中  $p_x = dx/dt$ ,  $p_y = dy/dt$ ,  $p_z = dz/dt$ . 对于给定的核间距, 我们使用蒙特卡罗方法在符合基态能量的范围内随机产生 10000 组不同的初始位置  $(x, y, z)$  和初始动量  $p_x, p_y, p_z$ , 使其能量满足  $H_2^+$  在不同核间距  $R$  下的基态能量  $V_g(R)$ , 即满足关系

$$\frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \frac{p_z^2}{2} + \frac{1}{R} + V_e(x, y, z, R) = V_g(R).$$

然后利用四阶-五阶 Runge-Kutta 算法解这一微分方程组, 计算电子的轨迹. 当脉冲结束时统计终态能量  $H \geq 0$  的轨道数目, 这一数目与总数的比值就是这一核间距  $R$  下的电离率. 激光场的表达式为

$$E(t) = E_0 \sin(\omega_0 t) \sin^2\left(\frac{\pi t}{5T_0}\right), \quad 0 < t < 5T_0, \quad (6)$$

其中  $E_0$  为电场幅值,  $\omega_0$  为激光角频率, 激光周期  $T_0 = 2\pi/\omega_0$ . 在本文中, 激光的频率定为 0.043 a.u. (对应的波长为 1064 nm). 图 1 给出了强度为  $4 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup> 时激光脉冲的示意图.

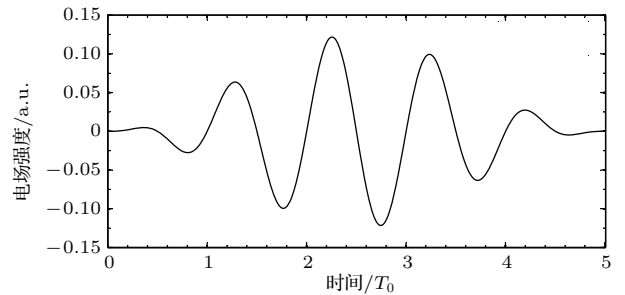


图 1 激光场随时间的变化曲线 (激光强度为  $4 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup>, 波长为 1064 nm, 脉冲宽度为五个振动周期)

Fig. 1. The electric field (laser intensity  $4 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup>, wavelength 1064 nm, five cycles).

## 3 结果和讨论

图 2 显示了在图 1 所示激光脉冲作用下不同核间距  $R$  所对应的经典电离概率, 结果表明在  $R = 3.5–12$  a.u. 区间内电离几率超过 0.3, 这相

比氢原子在相似参数激光作用下的电离率<sup>[33]</sup>有显著放大,且在 $R = 5$  a.u. 处电离概率有一个明显的峰值. 我们的经典模型不能正确描述电子在两个束缚态之间的跃迁,因而也就不能重现Zuo和Bandrauk<sup>[16]</sup>计算中显示的两个电离率的峰值. 但我们的模型定性地得到电离增强效应.

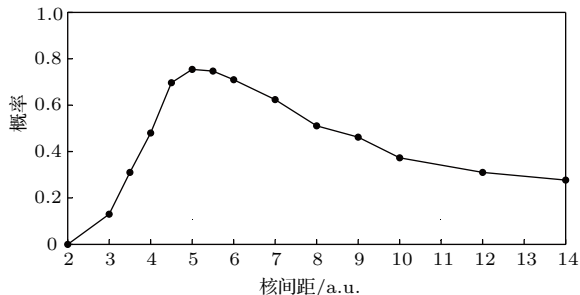


图2  $H_2^+$  的电离率和原子核间距之间的关系, 激光参数同图1

Fig. 2. The ionization probability of  $H_2^+$  as a function of the internuclear distance. The laser parameters are same as those in Fig. 1.

为了给出电离增强的直观图像,我们在图3中给出了激光场作用下电子的典型轨迹. 图3(a)—

图3(f)分别对应不同的初始条件. 图3(a)—图3(c)电子的初位置态均靠近左边的原子核, 经激光作用后, 从右侧的原子核电离. 图3(d)—图3(f)电子的初位置态均靠近右边的原子核, 经激光作用后, 从左侧的原子核电离. 从电子的运动轨迹可以看出, 当电子初始位于某个原子核附件时, 在激光作用下, 电子首先继续绕着这个原子核旋转, 并逐步积聚动能. 当动能足够大时, 电子越过两个原子核之间的库仑势垒, 来到另一个原子核附近. 在激光场的作用下, 电子从另一个原子核逃逸出去. 当然, 也存在另一种可能性, 即电子来到另一个原子核后, 还会再回到第一个原子核(如图3(a)所示), 并在两个原子核之间做着“8”字形的运动, 最后逃逸出去. 另外, 我们还观测了大量的电子轨迹, 在电离增强的区域内, 电子一般都是首先越过两个原子核间的库仑势垒, 然后经过另一个原子核并逃逸(满足这一逃逸图像的电子轨道所占比例分别为 $R = 4$  a.u., 100.0%;  $R = 6$  a.u., 99.0%;  $R = 8$  a.u., 98.4%;  $R = 10$  a.u., 95.4%;  $R = 12$  a.u., 94.0%).

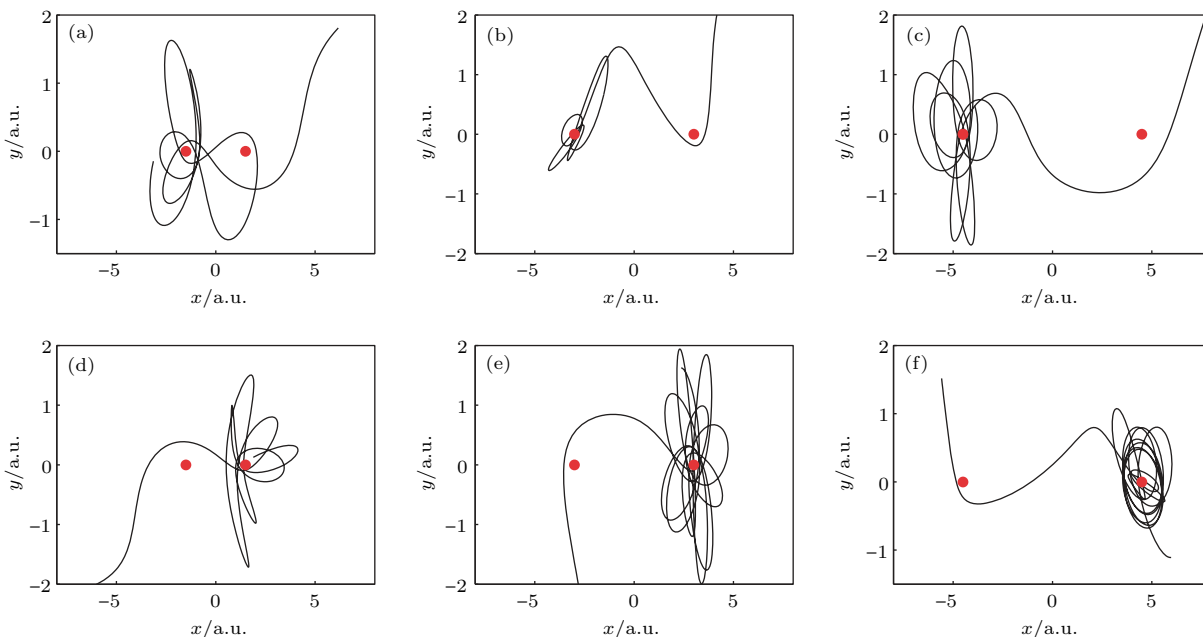


图3 (网刊彩色) 电子在激光作用下电离的典型轨迹, 激光参数同图1(红点为原子核位置) (a)  $R = 3$  a.u.,  $x = -0.2590$  a.u.,  $y = 0.6243$  a.u.,  $z = 1.0111$  a.u.; (b)  $R = 6$  a.u.,  $x = -2.4901$  a.u.,  $y = -0.6550$  a.u.,  $z = -1.5433$  a.u.; (c)  $R = 9$  a.u.,  $x = -4.9522$  a.u.,  $y = -1.3168$  a.u.,  $z = 0.5875$  a.u.; (d)  $R = 3$  a.u.,  $x = 2.7029$  a.u.,  $y = -0.1880$  a.u.,  $z = 0.6590$  a.u.; (e)  $R = 6$  a.u.,  $x = 1.4983$  a.u.,  $y = -0.6800$  a.u.,  $z = 0.4879$  a.u.; (f)  $R = 9$  a.u.,  $x = 4.6439$  a.u.,  $y = -1.3845$  a.u.,  $z = -0.2587$  a.u.

Fig. 3. (color online) Typical electron trajectories driven by the laser field. The laser parameters are same as those used in Fig. 1. The red spots in each panel represent the nuclei: (a)  $R = 3$  a.u.,  $x = -0.2590$  a.u.,  $y = 0.6243$  a.u.,  $z = 1.0111$  a.u.; (b)  $R = 6$  a.u.,  $x = -2.4901$  a.u.,  $y = -0.6550$  a.u.,  $z = -1.5433$  a.u.; (c)  $R = 9$  a.u.,  $x = -4.9522$  a.u.,  $y = -1.3168$  a.u.,  $z = 0.5875$  a.u.; (d)  $R = 3$  a.u.,  $x = 2.7029$  a.u.,  $y = -0.1880$  a.u.,  $z = 0.6590$  a.u.; (e)  $R = 6$  a.u.,  $x = 1.4983$  a.u.,  $y = -0.6800$  a.u.,  $z = 0.4879$  a.u.; (f)  $R = 9$  a.u.,  $x = 4.6439$  a.u.,  $y = -1.3845$  a.u.,  $z = -0.2587$  a.u..

激光作用下分子的库仑场会被调制。在每个激光周期内，库仑势场的一端被抬升，另一端被压低。图4显示了不同核间距  $R$  对应的库仑势场在激光场的作用下在某一瞬时 ( $t_1 = 1.8T_0$ ) 调制后的库仑场

$$V_{t1}(x, 0, 0) = -\frac{1}{\sqrt{(x - R/2)^2 + q_e}} - \frac{1}{\sqrt{(x + R/2)^2 + q_e}} + x \cdot E_{t1},$$

其中  $E_{t1} = 0.2350$  a.u.. 显然，当原子核距离较大时，两个原子核间的库仑势垒就比较高，同时某一端的库仑势也会被压得更低。

既然经典轨迹揭示电离增强时，电子一般首先越过库仑势垒来到另一个原子核附近，然后逃离其束缚，那么原子核间库仑势垒的高度 ( $V_A$ ，如图4中A点所示)与激光调制后外侧势垒的高度 ( $V_B$ ，如图4中B点所示)反映了分子库仑场对电子的束缚能力。  $V_A$  和  $V_B$  中的更高的势垒决定了分子对电子的束缚能力。

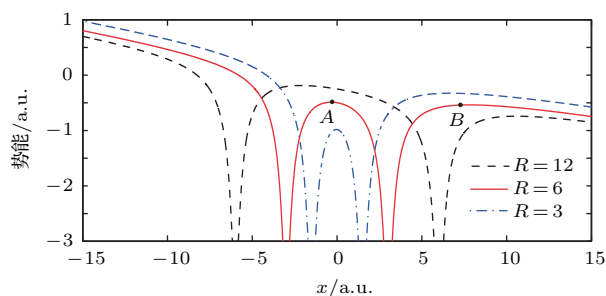


图4 (网刊彩色) 瞬时激光场调制的库仑势，瞬时场强为 0.2350 a.u..

Fig. 4. (color online) Laser distorted Coulomb potential when the instant laser field is 0.235 a.u..

图5给出了当瞬时激光强度分别为  $2.8 \times 10^{13}$  和  $4 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup> 时，系统的基态能量  $V_g(R)$  和  $V_A$ 、 $V_B$  中的大值的高度之差，即  $\Delta V(R) = V_g(R) - \max(V_A(R), V_B(R))$ 。图5中的曲线形状和图2中的曲线形状非常类似。当  $R$  约为 5.5 a.u. (瞬时光强  $2.8 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup> 时) 或者 4.5 a.u. (瞬时光强  $4 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup> 时) 时， $\Delta V(R)$  最高，则自然推测电离率最大。当原子核间距过大或过小时，电子都会处于类似氢原子中电子的势阱中，经过激光场的作用后  $\Delta V(R)$  仍很低，难以发生电离。通过两条曲线的比较可看出  $\Delta V(R)$  最高时对应的  $R$  的取值和激光的瞬时强度也有关系，这可以解释电离峰值对应的  $R$  和激光强度有关。

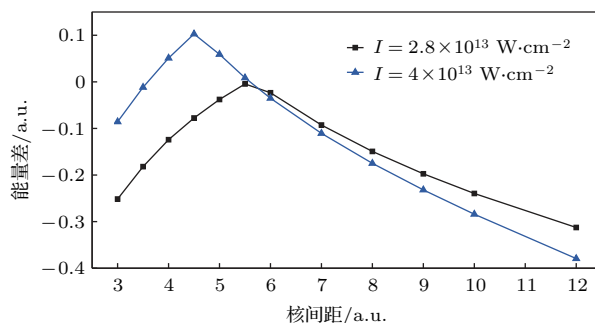


图5 不同核间距下体系基态能量与较高势垒能量差 激光的瞬时强度分别为  $2.8 \times 10^{13}$  和  $4 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup>

Fig. 5. Energy difference between the ground state and the higher Coulomb barrier at different internuclear distance. The instant laser intensity is  $2.8 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup> and  $4 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup>.

## 4 结 论

我们的经典系综的计算给出了电子的运动轨迹，从而给出了电离增强效应的直观图像：电子首先围绕一个原子核运动，在逐步获得能量后越过两个原子核间的库仑势垒，经过另一个原子核并逃逸出分子。电离率和原子核间距的关系和分子基态能量与分子间库仑势垒或者激光调制的分子库仑势的能量差直接相关。尽管此计算模型不能描述电子在束缚态之间的量子跃迁，但可以定性给出分子隧穿电离的直观物理图像，从而为电荷共振电离现象的理解提供了新的视角。

## 参考文献

- [1] Krausz F, Ivanov M 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 163
- [2] L'Huillier, Schafer K J, Kulander K C 1991 *J. Phys. B* **24** 3315
- [3] Zhou X X, Li B W 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1902 (in Chinese) [周效信, 李白文 2001 物理学报 **50** 1902]
- [4] Sukharev M E, Krainov V P 1998 *J. Opt. Soc. Am. B: Opt. Phys.* **15** 2201
- [5] Winter M, Schmidt R, Thumm U 2009 *Phys. Rev. A* **80** 031401
- [6] Guo C, Li M, Nibarger J P, Gibson G N 1998 *Phys. Rev. A* **58** R4271
- [7] Gibson G N, Li M, Guo C, Neira J 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 2022
- [8] He F, Ruiz C, Becker A 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 083002
- [9] He F, Becker A, Thumm U 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 213002
- [10] He F, Thumm U 2010 *Phys. Rev. A* **81** 053413
- [11] He F 2012 *Phys. Rev. A* **86** 063415
- [12] Rankin R, Capjack C E, Burnett N H, Corkum P B 1991 *Opt. Lett.* **16** 835

- [13] Fittinghoff D N, Bolton P R, Chang B, Kulander K C 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2642
- [14] Paulus G G, Nicklich W, Zacher F, Lambropoulos P, Walther H 1996 *J. Phys. B* **29** L249
- [15] Yu X G, Wang B B, Chen T W, Li X F, Fu P M 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3542 (in Chinese) [余晓光, 王兵兵, 程太旺, 李晓峰, 傅盘铭 2005 物理学报 **54** 3542]
- [16] Zuo T, Bandrauk A D 1995 *Phys. Rev. A* **52** R2511
- [17] Staudte A, Pavičić D, Chelkowski S, Zeidler D, Meckndel M, Niikura H, Schöffler M, Schössler S, Ulrich B, Rajeev P P, Weber Th, Jahnke T, Villeneuve D M, Bandrauk A D, Cocke C L, Corkum P B, Dörner R 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 073003
- [18] Ben-Itzhak I, Wang P Q, Saylor A M, Carnes K D, Leonard M, Esry B D, Alnaser A S, Ulrich B, Tong X M, Litvinyuk I V, Maharjan C M, Ranitovic P, Osipov T, Ghimire S, Chang Z, Cocke C L 2008 *Phys. Rev. A* **78** 063419
- [19] Xu H, He F, Kiepiniski D, Sang R T, Litvinyuk I V 2015 *Sci. Rep.* **5** 13527
- [20] Xin L, Qin H C, Wu W Y, He F 2015 *Phys. Rev. A* **92** 063803
- [21] Liu H, Li M, Xie X G, Wu C, Deng Y K, Wu C Y, Gong Q H, Liu Y Q 2015 *Chin. Phys. Lett.* **32** 063301
- [22] Bocharova I, Karimi R, Penka E F, Brichta J P, Lassonde P, Fu X, Kieffer J C, Bandrauk A D, Litvinyuk I, Sanderson J, Légaré F 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 063201
- [23] Lötstedt E, Kato T, Yamanouchi K 2012 *Phys. Rev. A* **85** 041402
- [24] Xi C, Chu S 2000 *Phys. Rev. A* **63** 013414
- [25] Plummer M, McCann J F 1996 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29** 4625
- [26] Tsogbayar T, Horbatsch M 2013 *J. Phys. B* **46** 085004
- [27] Rzaewski K, Mewenstein, Salières P 1994 *Phys. Rev. A* **49** 1196
- [28] Grobe R, Law C K 1991 *Phys. Rev. A* **44** R4114
- [29] Qu W X, Hu S X, Xu Z Z 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 571 (in Chinese) [屈卫星, 胡素兴, 徐至展 1998 物理学报 **47** 571]
- [30] Balcou Ph, L'Huillier A, Escande D 1996 *Phys. Rev. A* **53** 3456
- [31] Bandarage G, Maquet A, Cooper J 1990 *Phys. Rev. A* **41** 1744
- [32] Cocke S, Reichl L E 1996 *Phys. Rev. A* **53** 1746
- [33] Chelkowski S, Foisy C, Bandrauk A D 1998 *Phys. Rev. A* **57** 1176
- [34] Li M, Geng J W, Liu H, Deng Y, Wu C, Peng L Y, Gong Q H, Liu Y Q 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 113002
- [35] Duan Y W, Liu W K, Yuan J M 2000 *Phys. Rev. A* **61** 053403

# Internuclear-distance-dependent ionization of $\text{H}_2^+$ in strong laser field in a classical perspective\*

Yu Zu-Qing Yang Wei-Ji He Feng<sup>†</sup>

(Key Laboratory for Laser Plasma (Ministry of Education), Collaborative Innovation Center of IFSA (CICIFSA), Department of Physics and Astronomy, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

( Received 6 June 2016; revised manuscript received 27 June 2016 )

## Abstract

Ionizations of atoms and molecules in strong laser fields are fundamental processes of ultrafast physics. Compared with atom ionization, molecular ionization is very complex due to the existence of multi Coulomb centers. As a simplest molecule,  $\text{H}_2^+$  has been widely used to explore new phenomena of molecules in strong laser fields. One of the notable processes in  $\text{H}_2^+$  ionization is charge resonance enhanced ionization (CREI), in which the ionization rate is enhanced substantially when the internuclear distances are around 6 a.u. and 10 a.u. CREI has been extensively studied by numerically simulating the time-dependent Schrödinger equation. While quantum calculations provide accurate ionization rates, the mechanism governing the CREI is not revealed in such ab-initio calculations. On the contrary, the calculations based on the classical trajectories Monte-Carlo assembly may offer an intuitive picture for CREI though some quantum information is not included. In this paper, we revisit the CREI of  $\text{H}_2^+$  in a strong infrared laser field by Monte-Carlo simulation. By initializing ten-thousand classical points whose initial positions and velocities satisfy the field-free Hamiltonian of  $\text{H}_2^+$ , we solve the classical Newtonian equation and obtain the trajectories of all particles, from which one may analyze the particle velocities, energies, etc. We count the ionization events by diagnosing the particle energy after the laser interaction. If the sum of the kinetic energy and potential energy is larger than 0, we set it as an ionization event. The ionization rate is calculated by collecting all ionization events and normalizing it with the total particle number involved in the calculation. By setting the internuclear distances to be different values, we obtain the ionization rate as a function of internuclear distance. Our simulation shows that the ionization probability is greatly enhanced when the internuclear distance is about 5 to 6 a.u. by employing a 1064 nm,  $4 \times 10^{13}$  W/cm<sup>2</sup>, five cycles laser pulse. By tracing the particle trajectory, we find that the electron usually gains the energy from the laser field by circulating one nucleus, then passes through the interatomic barrier and moves around the other nucleus before being ionized. By looking into the relationship between the ionization probability and the laser-distorted Coulomb potential at different internuclear distances, we find that the ionization probability is maximum when the energy difference between the ground state and the interatomic Coulomb barrier, or between the ground state and the saddle value of the laser-distorted potential, is minimum. The classical calculation of the ionization of  $\text{H}_2^+$  interacting with intense laser field reproduces the qualitative features of the corresponding quantum-mechanical calculation. It offers an intuitive physical picture of the tunneling ionization of molecules through investigating the classical trajectories and provides a new perspective to inspect the intriguing phenomena in quantum systems.

**Keywords:** electron trajectory,  $\text{H}_2^+$ , strong laser pulse, enhanced ionization

**PACS:** 42.50.Hz, 32.80.Rm, 42.65.Re

**DOI:** 10.7498/aps.65.204202

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11322438, 11574205).

† Corresponding author. E-mail: [fhe@sjtu.edu.cn](mailto:fhe@sjtu.edu.cn)