

改进的 Keldysh-Faisal-Reiss 理论*

陈 宝 振

北京师范大学低能核物理研究所, 北京 100875

1991年12月23日收到

在 Keldysh-Faisal-Reiss(缩写为 KFR)理论框架内, 考虑了光场与原子势之间的耦合作用, 对原有的 KFR 理论作了改进, 得到了原子光电离概率的新的解析表达式. 由这个新表达式产生的短脉冲强激光中氢原子阈上电离电子谱线与最近的实验谱线符合得比较好. 由此对实验谱线提出了新的解释.

PACC: 3280K

一、引 言

由于激光技术的发展, 实验室中的激光束已达到很高的强度 ($10^{15} \sim 10^{17} \text{ W/cm}^2$) 这样强的激光所产生的作用已达到或超过基态氢原子所感受到的库仑作用. 强光场中原子的过程和行为将出现全新的特点是很自然的事. 近年来实验上发现并证实阈上电离现象就是一个突出的例子. 对新的实验事实的理论解释也自然成了近年来强光-原子相互作用领域中的一个热点. 问题的困难在于, 对这样强的激光场, 把它作为微扰来处理的传统的微扰论已不适用; 近似的非微扰方法是当前的流行作法. 在各种各样的非微扰方法中^[6,10], KFR 理论具有独特的优点. 它对阈上电离的许多实验事实给出了较好的定性或半定量的解释^[4,5,9,13]. 从物理实质上看, KFR 理论的一个极大的欠缺是没有考虑光场与原子势之间的耦合. 本文将在 KFR 理论框架内, 考虑光场与原子势之间的耦合.

二、KFR 理论简介

为比较方便, 先简要罗列 KFR 理论结果.

1. Keldysh 为强光中原子电离理论做了开创性的工作. 他的理论本质上是一个准经典的绝热近似理论. 他的主要结果是下面的原子光电离概率 W 表达式^[4]:

$$W \sim \exp \left[-\frac{2|E_i|}{\omega} f(r) \right], \quad (1)$$

* 国家自然科学基金资助的课题.

$$f(\gamma) = \left(1 + \frac{1}{2\gamma^2}\right) \arcsin h\gamma - \frac{\sqrt{1+\gamma^2}}{2\gamma}; \quad \gamma = \frac{\sqrt{2|E_i|}\omega}{s}, \quad (2)$$

式中 E_i 为原子束缚能; ω 为光场频率; s 为光场电矢量振幅.

2. Faisal 和 Reiss 等人分别用两种不同的方法,改进了 Keldysh 的上述工作,得到了相同的原子吸收 N 光子电离的微分概率表达式^[2,3]

$$\frac{dW^l(N)}{d\Omega} = \rho_{k_i}(E_i - E_f)^2 |\tilde{\phi}_i(\mathbf{k}_i)|^2 \left| J_N\left(\mathbf{k}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_0, \frac{-\Delta^l}{2}\right) \right|^2 \times \delta(E_i - E_f - N\omega - \Delta^l\omega), \quad (3a)$$

$$\frac{dW^c(N)}{d\Omega} = \rho_{k_i}(E_i - E_f)^2 |\tilde{\phi}_i(\mathbf{k}_i)|^2 |J_N(\mathbf{k}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_0)|^2 \delta(E_i - E_f - N\omega - \Delta^c\omega), \quad (3b)$$

式中 $\mathbf{k}_i$ 为终态电子波矢, $k_i = \sqrt{2E_i}$; $\tilde{\phi}_i(\mathbf{k}_i)$ 为束缚态波函数的傅里叶变换; ρ_{k_i} 为终态电子密度; $\Delta^l\omega, \Delta^c\omega$ 为光场-电子平均相互作用能,上标 l, c 表示线极化、圆极化; $\boldsymbol{\alpha}_0 = A_0/c\omega$; A_0 为光场矢量势振幅. 由 (3a) 和 (3b) 式可较好地说明阈上电离的许多实验事实^[4,5,9,10]. 关于 Faisal 和 Reiss 的结果与 Keldysh 结果之间的关系,即 (3) 与 (1) 式之间的内在联系,文献[12]给了解析的说明. 以上是 KFR 理论的主要结果.

我们知道,原子光电离是在光场作用下原子由束缚态到连续态的跃迁. 在 KFR 理论中,无论是 Keldysh 还是 Faisal 或 Reiss,在他们的推导过程中都利用了下面这样一个近似:在得到束缚态波函数时,只考虑了原子势的作用而忽略了光场的作用;在得到连续态波函数时只考虑了光场的作用而忽略了原子势的作用. 按照一个严格的散射理论,在束缚初态和连续终态中应有一个同时考虑光场与原子势的作用. 这就是说,光场与原子势之间的耦合被忽略了. 在强光场中,这个耦合是重要的. 下面我们将考虑这个耦合的影响.

三、改进的 KFR 理论

按照量子力学的语言,原子光电离(或光场电子势散射)过程的一个完整的理论描述可从光场中薛定谔方程出发,利用非定态散射理论求出原子由束缚初态到连续终态(或电子由连续初态到连续终态)的跃迁概率,以下将求出这一跃迁概率的具体的解析表达式,重点在于说明光场与原子势之间的耦合的作用.

严格的光与原子相互作用的理论要求同时用量子理论来处理光场、原子及它们之间的相互作用. 如果光场很强,那末在考虑光场中的原子过程时,将光场作为经典外场来处理是一个很好的近似. 这就是所谓的半经典理论. 在这理论框架内,光场中原子(或势场中的电子)的薛定谔方程为

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) = [H_0 + H_1] \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t), \quad (4)$$

式中 $H_0 = -\frac{\Delta}{2} + V(\mathbf{r})$, 原子(或势场中电子)哈密顿量;

$$H_1 = \frac{A^2}{2c^2} + i\mathbf{A} \cdot \nabla/c, \text{ 光场-电子相互作用哈密顿量.}$$

根据非定态散射理论,在光场作用下,原子(或势场中的电子)由初始束缚态(或初始连续态) i 到连续终态 f 的跃迁振幅为

$$A_{if} = \int_{-\infty}^t dt \langle \tilde{\Psi}_i | H_1 | \Phi_f \rangle. \quad (5)$$

显然, $\tilde{\Psi}_i$ 应满足下面的条件:

$$\tilde{\Psi}_i \xrightarrow{A \rightarrow 0} \Phi_i,$$

式中 Φ_i 和 Φ_f 分别为原子的初始束缚态波函数和连续终态波函数。即 $\Phi_f = \phi_f e^{-iE_f t}$, ϕ_f 为方程

$$H_0 \phi_f = E_f \phi_f \quad (6)$$

的束缚(或连续)解。

为了得到(5)式的具体表达式,需要求出 $\tilde{\Psi}_i$ 和 Φ_f 的具体表达式。

为了得到 $\tilde{\Psi}_i$ 和 Φ_f 的具体表达式,首先要给出原子势和光场的具体形式。

不失一般性,设原子势是球对称的,即

$$V(\mathbf{r}) = V(r). \quad (7)$$

对于光场,作如下近似: 光场是空间均匀的、单色的。仅随时间周期振荡,即光场的矢量势可写为

$$\text{对于圆偏振 } \mathbf{A}(t) = A_0(\mathbf{e}_x \cos \omega t + \lambda \mathbf{e}_y \sin \omega t), \quad (8a)$$

$$\text{对于线偏振 } \mathbf{A}(t) = A_0 \cos \omega t. \quad (8b)$$

寻找方程(4)的如下形式的解:

$$\tilde{\Psi}_i = \exp \left[-i \int^t H_1(t') dt' \right] \tilde{\phi}_i. \quad (9)$$

将(9)式代入(4)式,可得关于 $\tilde{\phi}_i$ 的方程。

$$i \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}_i = \left[-\frac{\Delta}{2} + V(|\mathbf{r} - \alpha(t)|) \right] \tilde{\phi}_i, \quad (10)$$

式中

$$\alpha(t) = \frac{1}{c} \int^t \mathbf{A}(t') dt', \quad (11)$$

$V(|\mathbf{r} - \alpha(t)|)$ 称为场缀原子势。它反映了光场与原子势之间的耦合。显然,它是一个非定态势,并且是时间的周期函数,即

$$V(|\mathbf{r} - \alpha(t + 2\pi/\omega)|) = V(|\mathbf{r} - \alpha(t)|). \quad (12)$$

利用这一周期性可以将它作 Fourier 展开

$$V(|\mathbf{r} - \alpha(t)|) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n e^{in\omega t}, \quad (13)$$

$$V_n = \int V(|\mathbf{r} - \alpha(t)|) e^{-in\omega t} dt. \quad (14)$$

同时可以将(10)式中的 $\tilde{\phi}_i$ 作广义的 Floquet 展开,

$$\tilde{\phi}_i = e^{-iE_i t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \tilde{\phi}_{in}(\mathbf{r}) e^{in\omega t}, \quad (15)$$

式中 $\tilde{E}_i$ 为准能量.

将(13), (15)二式代入(10)式, 就可将非定态方程(10)化为关于 Floquet 分量 $\tilde{\phi}_{i,n}$ 的定态方程组

$$\left[-\frac{\Delta}{2} + V_0 - (\tilde{E}_i + n\omega) \right] \tilde{\phi}_{i,n} = - \sum_{\substack{m=-\infty \\ (m \neq n)}}^{\infty} V_{n-m} \tilde{\phi}_{i,m}. \quad (16)$$

关于这个方程的解法, 文献[11, 14]中已进行过一般的或数值的讨论. 即给出 $\tilde{E}_i$ 和 $\tilde{\phi}_{i,n}$ 的具体解法. 特别是文献[11]给出了氢原子在各种不同光强下, 主量子数 $n=1, 2, 3, 4$ 的各能级的 $\tilde{E}_i$ 数值. 利用这些结果, 将(15)式代入(9)式, 之后再代入(5)式, 则可得原子吸收 N 光子电离的微分概率表达式^[3]

$$\frac{d\tilde{W}(N)}{d\Omega} = \begin{cases} \rho_{\mathbf{k}_i}(\tilde{E}_i - E_i)^2 \left| \sum_n \int d\mathbf{k} J_{N-n}(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\alpha}_0, \frac{-\Delta^1}{2}) \right. \\ \quad \times \tilde{\phi}_{i,n}(\mathbf{k}) \tilde{\phi}_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}_i) \left. \right|^2 \delta(\tilde{E}_i - E_i + N\omega - \Delta^1\omega); \\ \rho_{\mathbf{k}_i}(\tilde{E}_i - E_i)^2 \cdot \left| \sum_n \int d\mathbf{k} J_{N-n}(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\alpha}_0) \tilde{\phi}_{i,n}(\mathbf{k}) \tilde{\phi}_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}_i) \right|^2 \\ \quad \times \delta(\tilde{E}_i - E_i + N\omega - \Delta^e\omega). \end{cases} \quad (17)$$

(17) 式等号右端第一行是适用线极化光场, 第二行适用于圆极化光场.

$\tilde{\phi}_{i,n}(\mathbf{k})$ 为 $\tilde{\phi}_{i,n}(\mathbf{r})$ 的 Fourier 变换; $\tilde{\phi}_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}_i)$ 为波矢为 $\mathbf{k}_i$ 的 $\phi_i(\mathbf{r})$ 的 Fourier 变换.

$J_M(a, b)$ 为两个宗量的贝塞耳函数, 它的定义为

$$J_M(a, b) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_{M+2n}(a) J_n(b). \quad (18)$$

与(3)式相比, (17)式的改进在于: 由于光场与原子势之间耦合作用, 1) 原子的能级由 E_i 变为 $\tilde{E}_i$; 2) 原子的波函数由 ϕ_i 变为 $\tilde{\phi}_{i,n}$. 这两个变化的后果, 在下面的例子中阐述.

四、改进理论的应用

作为上述理论的一个应用. 下面利用上述理论计算强光场中氢原子阈上电离电子谱. 之所以要作这样的计算, 是因为最近 Welge 等人^[15]发表了他们的实验结果. 就作者所知, 文献上还未见到针对 Welge 实验的理论工作.

1. Welge 实验结果

Welge 等人的实验结果, 在图 1 中给出. 这是从文献[15]中复制出来的.

实验条件是, 采用光子能量为 2.04 eV 的线极化光场. 光强为 $I \cong 1.0 \times 10^4 \text{ W/cm}^2$. 光脉冲持续时间为 $\tau \cong 0.4 \text{ ps}$. 他们的结论是:

1) 2eV 以下的谱线是吸收 8 个光子产生的; 这部分谱线的细结构是原子能级间的共振产生的. 2) 9 个光子和 10 个光子谱线, 没有细结构, 是因为探测器在高端分辨率太低.

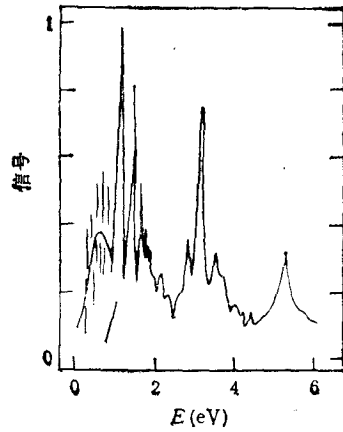


图1 实验谱线

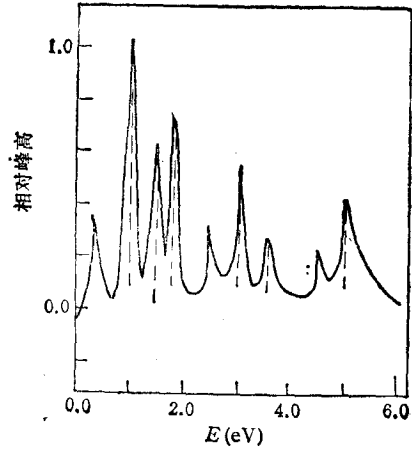


图2 计算谱线

2. 上述谱线的理论计算

由于 Welge 实验采用的是短脉冲激光, 光场对电离了的电子的作用可以忽略. 这表明由 (17) 式来计算谱线的位置和高度是合适的. 在运用 (17) 式时, 首先遇到的问题是给出 $\tilde{E}_i$, $\tilde{\phi}_{in}$ 和 $\tilde{\phi}_i(\mathbf{k}, \mathbf{k}_i)$ 的具体形式.

正如文献[14]所证明的, 在零阶近似下, 微扰方程和高频近似方程是一样的. 所以, 在零阶近似下, 可作如下的近似选择:

1) $\tilde{E}_i$ 取高频近似的数值结果(见表1); 2) $\tilde{\phi}_i(\mathbf{r})$ 取类氢近似; 3) $\phi_i(\mathbf{r})$ 取平面波近似. 就定性的讨论而言, 这些近似将大大减少计算, 又不会丧失物理实质. 这样, (17) 式可简化为

表1 不同光强下, α_0 , $\omega\Delta^1$ 和 $\tilde{E}_i$ 的数值

I	10^{14}	8×10^{13}	6×10^{13}	5×10^{13}	4.1×10^{13}	3.7×10^{13}	3.0×10^{13}
α_0	6.7	6.0	5.2	4.7	4.2	4.1	3.7
$\omega\Delta^1$	0.127	0.101	0.076	0.064	0.052	0.046	0.038
1s	0.155	0.170	0.185	0.22	0.256	0.272	0.30
2p	0.120	0.127	0.135	0.138	0.14	0.142	0.145
2s	0.07	0.072	0.075	0.080	0.083	0.086	0.09
$\tilde{E}_{i3d}$	0.07	0.069	0.0675	0.065	0.063	0.062	0.06
3p	0.052	0.053	0.055	0.052	0.049	0.047	0.045
3s	0.038	0.039	0.04	0.045	0.048	0.051	0.055
4d	0.035	0.035	0.035	0.033	0.0325	0.032	0.031
4f	0.035	0.034	0.0335	0.0332	0.032	0.0328	0.0325
4p	0.030	0.031	0.031	0.0315	0.032	0.031	0.0325
4s	0.025	0.025	0.025	0.0256	0.026	0.0263	0.027

注: 光强 I 的单位为 W/cm^2 , 其它各量均取为 au; $\tilde{E}_i$ 的数值取自文献[11].

表 2 不同光强下,光电子峰的位置 E_f 和高度 $W(N)$

$I(W/cm^2)$	10^{14}	8×10^{13}	6×10^{13}	5×10^{13}	4.1×10^{13}	3.7×10^{13}
$W(4)$	9(-5)	8(-5)	5(-5)	4(-6)		
四光子峰			2.8(-3)	1(-3)		
$E_f(eV)$	0.5	0.8	1.07	0.4		
$W(5)$	3.6(-4)	2(-4)	8(-5)	2(-5)	3(-6)	1(-6)
五光子峰			1.3(-3)	9(-4)	2.1(-3)	1.7(-3)
$E_f(eV)$	2.5	2.8	3.1	2.4	1.8	1.5
$W(6)$	4(-6)	2(-4)	5.8(-4)	1.5(-5)	3(-6)	1(-6)
六光子峰			6.7(-4)	5(-4)	6.7(-4)	6.5(-4)
$E_f(eV)$	4.5	4.8	5.1	4.4	3.8	3.5

注: $W(N)$ 有两个数据时,下面的一个对应共振增强的结果.

$$\frac{d\tilde{W}(N)}{d\Omega} = \rho_{fi}(\tilde{E}_i - E_f)^2 \left| J_N \left(\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{a}_0^i, -\frac{\Delta^i}{2} \right) \right|^2 \times |\tilde{\phi}_i(\mathbf{k}_i)|^2 \delta(\tilde{E}_i - E_f + N\omega - \Delta^i\omega). \quad (19)$$

下面的计算就是利用(19)式进行的. 与(3)式相比,(19)式仍然包含光场原子势之间耦合所产生的能移和波函数的改变.

图 2, 是利用表 2 中的数据绘制的.

表 2 中的数据是由(19)式,在计算机上得到的.

五、结 论

1. 改进的理论得到的光电子谱与实验谱线相比,在谱线位置和相对峰高方面,大体相似.

2. Welge 等人认为低于 2 eV 的峰是吸收 8 个光子产生的;按照现在的结果,它们是由吸收 4 个光子或 5 个光子产生的.

作者感谢黄祖洽教授指导.

- [1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics (non-relativistic theory) (Pergamon Press, OXFORD, 1977), p. 295;
L. V. Keldysh, *Sov. Phys.-JETP*, **20**(1965), 1307.
- [2] F. H. M. Faisal, *J. Phys.*, **B6**(1973), L89.
- [3] H. R. Reiss, *Phys. Rev.*, **A22**(1980), 1786.
- [4] W. Becker, R. R. Schlicher and M. O. Scully, *J. Phys.*, **B19**(1986), L785;
B. Chen, F. H. M. Faisal, S. Jetzke, H. O. Lutz and P. Scanzano, *Phys. Rev.*, **A36**(1987), 4091.
- [5] H. R. Reiss, *J. Opt. Soc. Am.*, **B4**(1987), 726.
- [6] Z. Deng and J. H. Eberly, *J. Opt. Soc. Am.*, **B2**(1985), 486.
- [7] 姚关华、余玮、徐至展、陈荣清, *物理学报*, **39**(1990), 35.
- [8] 全晓明、李家明, *物理学报*, **40**(1991), 190.
- [9] 陈宝振, *北京师范大学学报(自然科学版)*, (2)(1989), 31.
- [10] H. G. Muller *et al.*, *J. Phys. B*, **16**(1983), L679.
- [11] M. Pont, M. J. Offerhaus and M. Gavrilu, *Z. Phys.*, **D9**(1988), 297.

- [12] B. Chen, ICPAEC XVII, Brisbane, Australia, (1991).
- [13] 陈宝振, 物理学报, **39**(1990), 40.
- [14] 陈宝振, 物理学报, **40**(1991), 1749.
- [15] H. Rottke, B. Wolff, M. Brickwedde, D. Feldmann and K. H. Welge, *Phys. Rev. Lett.*, **64**(1990), 404.

IMPROVED KELDYSH-FAISAL-REISS THEORY

CHEN BAO-ZHEN

Institute of Low Energy Nuclear Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875

(Received 23 December 1991)

ABSTRACT

In the framework of Keldysh-Faisal-Reiss (KFR) theory, with taking the coupling between the atomic potential and the applied light fields into account, the original KFR theory is improved and a new expression of photoionization probability of atoms is obtained.

From this new expression, photoelectron spectra of H-atom ATI by strong linear-polarized laser in the short-pulse regime are got. This calculated photoelectron spectra are rather similar to the experimental ones. A new explanation of the experimental spectra is given.

PACC: 3280K