

用二次型非谐振子模型研究强激光场中 双原子分子的多光子选择激发^{*}

戴 瑛¹⁾ 丁世良¹⁾²⁾

1)(山东大学化学系, 济南 250100)

2)(山东师范大学物理系, 济南 250014)

(1997 年 8 月 27 日收到; 1997 年 11 月 3 日收到修改稿)

应用二次型非谐振子模型研究在强激光场中双原子分子的多光子态选择激发. 计算了 HF 分子的态选择跃迁概率及分子平均吸收能量.

PACC: 3380; 0210

1 引 言

态选择多光子激发是目前分子反应动力学中一个非常活跃的课题. 近几年, 由于高功率超短脉冲激光器的出现, 实现了个别分子的选择性光解, 人们希望利用红外激光使“分子裁剪”的梦想成为现实. 因此, 在实验和理论上都重视分子选态激发的研究.

对于双原子分子大多采用 Morse 振子模型, 本文采用二次型非谐振子^[1]模型, 用李代数方法研究了双原子分子的振动多光子选择激发. 由于数学上二次型哈密顿量容易处理, 且其形式与谐振子相同, 因而应用该模型使薛定谔方程变得容易求解, 且数值计算量较小, 并能得到薛定谔方程精确解. 以 HF 分子为例计算了它的选态跃迁概率随时间及外场频率的变化关系, 讨论了分子平均吸收能量随时间变化的特点.

2 理 论

2.1 二次型非谐振子模型^[1]

二次型非谐振子模型是引进一个非谐性参数 $x_0 = 1/N$ (N 为体系总束缚态数的两倍), 对谐振子哈密顿量进行修正, 使得该模型在 $x_0 \neq 0$ 时代表 Morse 振子, $x_0 \rightarrow 0$ 的极限情况代表谐振子.

此模型给出双原子分子体系哈密顿量的代数形式为

$$\hat{H} = \hbar\omega_0 \left(\frac{\hat{P}^2}{2} + \frac{\hat{Q}^2}{2} \right), \quad (1)$$

^{*} 国家自然科学基金、吉林大学理论化学和计算国家重点实验室及山东省自然科学基金资助的课题.

式中 $\hat{P}$, $\hat{Q}$ 为算符, ω_0 是振子频率. 各算符间对易关系为

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = i\hat{I}_0, \quad [\hat{I}_0, \hat{P}] = -2ix_0\hat{Q}, \quad [\hat{I}_0, \hat{Q}] = 2ix_0\hat{P}, \quad (2)$$

其中 $\hat{I}_0$ 为一算符, $x_0 \rightarrow 0$ 时为恒等算符. $\hat{P}$, $\hat{Q}$ 可以由产生-湮没算子 $\hat{A}_+$, $\hat{A}_-$ 表示:

$$\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{A}_+ + \hat{A}_-), \quad \hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(\hat{A}_+ - \hat{A}_-). \quad (3)$$

$\hat{A}_+$, $\hat{A}_-$, $\hat{I}_0$ 之间的关系为

$$[\hat{A}_+, \hat{A}_-] = -\hat{I}_0, \quad [\hat{I}_0, \hat{A}_\pm] = \mp 2x_0\hat{A}_\pm. \quad (4)$$

相应的哈密顿量可写为

$$\hat{H} = \hbar\omega_0\left(\hat{A}_+\hat{A}_- + \frac{1}{2}\hat{I}_0\right). \quad (5)$$

二次型非谐振子体系的本征函数为 $|N, v\rangle$, v 是振动量子数. 且有

$$\hat{I}_0|N, v\rangle = (1 - 2x_0v)|N, v\rangle, \quad (6)$$

$$\hat{A}_+|N, v\rangle = \sqrt{(1 - x_0v)(v + 1)}|N, v + 1\rangle, \quad (7)$$

$$\hat{A}_-|N, v\rangle = \sqrt{[1 - x_0(v - 1)]v}|N, v - 1\rangle. \quad (8)$$

由此关系可得

$$\hat{H}|N, v\rangle = \hbar\omega_0(v - x_0v^2)|N, v\rangle. \quad (9)$$

2.2 含时薛定谔方程

对于孤立双原子分子与外激光场相互作用体系, 我们采用半经典偶极近似^[2], 分子体系是量子化的, 而激光场是经典的. 首先, 考虑无旋转情况, 激光与分子相互作用能为^[3]

$$\hat{H}' = -\mu(x)E_0\cos(\omega_1 t) = -q\hat{x}E_0\cos(\omega_1 t). \quad (10)$$

式中 q 为分子有效电荷, $\hat{x}$ 为距核间平衡位置的位移. E_0 为激光场强振幅, ω_1 为激光的圆频率.

据(1), (3)式, 可相应地令

$$\hat{x} = \frac{1}{a}\sqrt{\frac{\hbar\omega_0}{2D}}\hat{Q} = \frac{1}{a}\sqrt{\frac{\hbar\omega_0}{2D}}\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{A}_+ + \hat{A}_-). \quad (11)$$

式中 a , D 分别为分子的 Morse 参数和分解能.

系统总的哈密顿量为

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_1 + \hat{H}' \\ &= \hbar\omega_0\hat{A}_+\hat{A}_- + \frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{I}_0 - \frac{d}{\sqrt{2}}(\hat{A}_+ + \hat{A}_-) \\ &= \hat{H}_0 + V. \end{aligned} \quad (12)$$

式中

$$d = \frac{1}{a} \sqrt{\frac{\hbar \omega_0}{2D}} q E_0 \cos(\omega_1 t), \quad (13)$$

$$\hat{H}_0 = \hbar \omega_0 \hat{A}_+ \hat{A}_-, \quad (14)$$

$$V = \frac{\hbar \omega_0}{2} \hat{I}_0 - \frac{d}{\sqrt{2}} \hat{A}_+ - \frac{d}{\sqrt{2}} \hat{A}_-. \quad (15)$$

相互作用表象的薛定谔方程为

$$i \hbar \frac{\partial |\Psi_I(t)\rangle}{\partial t} = V_I(t) |\Psi_I(t)\rangle, \quad (16)$$

$$|\Psi_I(t)\rangle = U_I(t, t_0) |\Psi_I(t_0)\rangle, \quad (17)$$

式中

$$V_I(t) = \exp\left(\frac{i \hat{H}_0 t}{\hbar}\right) V \exp\left(\frac{i \hat{H}_0 t}{\hbar}\right). \quad (18)$$

将(14), (15)式代入(18)式得

$$\begin{aligned} V_I(t) &= e^{i \omega_0 t \hat{A}_+ \hat{A}_-} \left(\frac{\hbar \omega_0}{2} \hat{I}_0 - \frac{d}{\sqrt{2}} \hat{A}_+ - \frac{d}{\sqrt{2}} \hat{A}_- \right) e^{-i \omega_0 t \hat{A}_+ \hat{A}_-} \\ &= \frac{\hbar \omega_0}{2} \hat{I}_0 - \frac{d}{\sqrt{2}} e^{i 2 \omega_0 t \hat{A}_+ \hat{A}_-} e^{i \omega_0 t \hat{I}_0} \hat{A}_+ - \frac{d}{\sqrt{2}} e^{-i \omega_0 t \hat{I}_0} \hat{A}_- \\ &= \sum_i \alpha_i \hat{a}_i. \end{aligned} \quad (19)$$

式中

$$\alpha_1 = \frac{\hbar \omega_0}{2}, \quad (20)$$

$$\alpha_2 = -\frac{d}{\sqrt{2}} e^{2i \omega_0 t x_0}, \quad (21)$$

$$\alpha_3 = -\frac{d}{\sqrt{2}}, \quad (22)$$

$\hat{a}_i$ ($i=1, 2, 3$)为 $\hat{I}_0$, $\hat{a}_+ = e^{i \omega_0 t \hat{I}_0} \hat{A}_+$, $\hat{a}_- = e^{-i \omega_0 t \hat{I}_0} \hat{A}_-$.

$U_I(t, t_0)$ 为时间演化算子, 它满足方程

$$i \hbar \frac{d U_I(t, t_0)}{dt} = V_I(t) U_I(t, t_0), \quad (23)$$

$$U_I(t_0, t_0) = 1.$$

若设 $t_0=0$, 体系处于本征态 $|N, v\rangle$, 则 t 时刻分子从 v 态跃迁到 v_n 态的概率为

$$P_{v \rightarrow v_n}(t) = |\langle N, v_n | U_I(t, 0) | N, v \rangle|^2. \quad (24)$$

分子平均吸收能量为

$$\bar{\epsilon}(t) = \sum_n P_n(t) \epsilon_n. \quad (25)$$

由此可见, 要求概率的关键是求时间演化算子 $U_I(t, 0) = U_I(t)$.

2.3 时间演化算子

由于三个算符 $\hat{I}_0$, $\hat{a}_+$, $\hat{a}_-$ 间满足的对易关系为

$$[\hat{I}_0, \hat{a}_+] = -2x_0 \hat{a}_+, \quad [\hat{I}_0, \hat{a}_-] = 2x_0 \hat{a}_-, \quad [\hat{a}_-, \hat{a}_+] = B^* \hat{I}_0, \quad (26)$$

式中 $B = e^{i2\omega_0 x_0 t}$. 所以 $\hat{I}_0$, $\hat{a}_+$, $\hat{a}_-$ 组成一个动力学代数, 因此可以将时间演化算子写作^[4]

$$U_I(t) = \prod_{i=1}^3 e^{Z_i \hat{a}_i}, \quad (27)$$

Z_i 为复的与时间有关的群参数.

考虑到 $U_I(t)$ 的么正性

$$U_I^\dagger(t) U_I(t) = U_I(t) U_I^\dagger(t) = 1, \quad (28)$$

即

$$Z_2^* B(1 - Z_1^* x_0) + Z_3(1 + Z_1 x_0) + \frac{1}{3} Z_3^2 Z_2 B^* x_0 (Z_1 x_0 - 1) = 0, \quad (29)$$

$$2\text{Re}(Z_1) + \frac{1}{2} Z_3^* Z_2^* B(Z_1^* x_0 - 1) + \frac{1}{2} Z_3 Z_2 B^* (Z_1 x_0 - 1) = 0. \quad (30)$$

由此得

$$\text{Re}(Z_1) = -\frac{|Z_3|^2}{2 + \frac{1}{3}|Z_3|^2 x_0}, \quad (31)$$

$$Z_2 = \frac{1 + \text{Re}(Z_1) x_0 - i\text{Im}(Z_1) x_0 + \frac{1}{3}|Z_3|^2 x_0 [1 + \text{Re}(Z_1) x_0 + i\text{Im}(Z_1) x_0]}{[\text{Re}(Z_1) x_0 + i\text{Im}(Z_1) x_0 - 1] \left(1 - \frac{1}{9}|Z_3|^4 x_0^2\right)} Z_3^* B. \quad (32)$$

为求得 Z_i 满足的方程, 将(27)式代入(23)式

$$\begin{aligned} & i\hbar \frac{dU_I}{dt} U_I^{-1} \\ &= i\hbar [\beta_1 \hat{I}_0 + \beta_2 \hat{a}_+ + \beta_3 \hat{a}_- + \beta_4 \hat{I}_0 \hat{a}_+ + \beta_5 \hat{I}_0 \hat{a}_- + \beta_6 \hat{I}_0^2 + \beta_7 \hat{a}_+^2 + \beta_8 \hat{a}_+ \hat{a}_-] \\ &= \alpha_1 \hat{I}_0 + \alpha_2 \hat{a}_+ + \alpha_3 \hat{a}_-, \end{aligned} \quad (33)$$

式中

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \dot{Z}_1 - Z_2 \dot{Z}_3 B^*, \\ \beta_2 &= \dot{Z}_2 e^{-2x_0 Z_1} - \dot{Z}_3 Z_2^2 x_0 B^* e^{-2x_0 Z_1} + i4\omega_0 Z_3 Z_2^2 x_0^2 B^* e^{-2x_0 Z_1}, \\ \beta_3 &= \dot{Z}_3 e^{2x_0 Z_1}, \\ \beta_4 &= i\omega_0 Z_2 e^{-2x_0 Z_1} + i3\omega_0 Z_3 Z_2^2 B^* e^{-2x_0 Z_1}, \\ \beta_5 &= -i\omega_0 Z_3 e^{2x_0 Z_1}, \\ \beta_6 &= i\omega_0 Z_3 Z_2 B^*, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\beta_7 &= i 2 \omega_0 Z_2 Z_3 x_0^2 e^{-4 x_0 Z_1} B^*, \\ \beta_8 &= -i \omega_0 x_0 Z_2 Z_3.\end{aligned}\quad (34)$$

将(33)式等号两边对 $|N, \nu\rangle$ 取平均得

$$i \hbar \beta_1 + i \hbar \beta_6 (1 - 2 x_0 \nu) + i \hbar \beta_8 B^* \frac{[1 - x_0(\nu - 1)] \nu}{1 - 2 x_0 \nu} = \alpha_1. \quad (35)$$

方程两边同时作用到 $|N, \nu\rangle$ 上, 然后再向 $|N, \nu - 1\rangle$ 上投影得

$$i \hbar \beta_3 + i \hbar \beta_5 [1 - 2 x_0(\nu - 1)] = \alpha_3. \quad (36)$$

将 β_i, α_i 代入(35), (36)式可得

$$i \hbar \dot{Z}_3 = -\frac{d}{\sqrt{2}} e^{-2 x_0 Z_1} - \hbar \omega_0 [1 - 2 x_0(\nu - 1)] Z_3, \quad (37)$$

$$i \hbar \dot{Z}_1 = \frac{\hbar \omega_0}{2} - \frac{d}{\sqrt{2}} Z_2 e^{-2 x_0 Z_1} B^* - 2 \hbar \omega_0 Z_2 Z_3 x_0 B^* \left\{ \frac{[1 - x_0(\nu - 1)] \nu}{1 - 2 x_0 \nu} + 1 \right\}. \quad (38)$$

将(31), (32)式代入(37), (38)式得两独立方程

$$i \hbar \dot{Z}_3 = -\frac{d}{\sqrt{2}} \exp \left[\frac{2 x_0 |Z_3|^2}{2 + |Z_3|^2 x_0/3} - i 2 x_0 \text{Im} Z_1 \right] - \hbar \omega_0 [1 - 2 x_0(\nu - 1)] Z_3, \quad (39)$$

$$\begin{aligned}i \hbar \dot{Z}_1 &= \frac{\hbar \omega_0}{2} - \left\{ \frac{d}{\sqrt{2}} Z_3^* \exp \left(\frac{2 x_0 |Z_3|^2}{2 + |Z_3|^2 x_0/3} - i 2 x_0 \text{Im} Z_1 \right) \right. \\ &\quad \left. + 2 \hbar \omega_0 x_0 |Z_3|^2 \left[\frac{1 - x_0(\nu - 1)}{1 - 2 x_0 \nu} \nu + 1 \right] \right\} \frac{f}{g},\end{aligned}\quad (40)$$

式中

$$f = \left(1 - \frac{x_0 |Z_3|^2}{2 + |Z_3|^2 x_0/3} \right) \left(1 + \frac{1}{3} |Z_3|^2 x_0 \right) - i x_0 \text{Im} Z_1 \left(1 - \frac{1}{3} |Z_3|^2 x_0 \right), \quad (41)$$

$$g = \left(-\frac{x_0 |Z_3|^2}{2 + |Z_3|^2 x_0/3} + i x_0 \text{Im} Z_1 - 1 \right) \left(1 - \frac{1}{9} |Z_3|^4 x_0^2 \right). \quad (42)$$

初条件为

$$Z_i \Big|_{i=1,3} = 0. \quad (43)$$

这是个耦合非线性方程组, 可通过数值解法求得 Z_i 并得到

$$U_1(t) = \exp \left[\left(-\frac{|Z_3|^2}{2 + |Z_3|^2 x_0/3} + i \text{Im} Z_1 \right) \hat{I}_0 \right] \exp \left(\frac{f}{g} Z_3^* B \hat{a}_+ \right) \exp (Z_3 \hat{a}_-). \quad (44)$$

将(44)式代入(24)式并利用(6), (7), (8)式, 即可求得跃迁概率.

3 计算结果

下面对 HF 分子进行具体计算.

设 $t=0$ 时, 体系处于基态 $|N, 0\rangle$, 采用原子单位, 各参数值^[5,6]为: 振子频率 $\omega_0 =$

$\sqrt{\frac{2D}{m}}a$ au, 解离能 $D=0.2251$ au, 约化质量 $m=1732$ au, Morse 参数 $a=1.1741$ au, 有效电荷 $q=0.3099$ au. 由以上数据可知 HF 分子共有 24 个束缚态(包括零级), 故

$$x_0 = \frac{1}{N} = \frac{1}{2 \times 23} = \frac{1}{46}.$$

3.1 分子的跃迁概率随外场频率的变化关系

调节 ω_l , E_0 参数, 使目标振动态跃迁概率达到局部最大值时的 E_r , ω_r 称为共振跃迁最佳值. 如果 ω_r 与跃迁频率 ω_n 接近, 即

$$\omega_r \cong \omega_n = \frac{(\epsilon_n - \epsilon_0)}{n\hbar}, \quad (45)$$

式中 $\epsilon_n - \epsilon_0$ 为基态与第 n 个激发态的能量差. 此时的激发称为 n 光子吸收^[2]. 据(9)式得各本征态能量为

$$\epsilon_1 - \epsilon_0 = 0.9783 \omega_0, \quad \epsilon_2 - \epsilon_0 = 1.913 \hbar\omega_0, \quad \epsilon_3 - \epsilon_0 = 2.804 \hbar\omega_0,$$

$$\epsilon_4 - \epsilon_0 = 3.652 \hbar\omega_0, \quad \epsilon_5 - \epsilon_0 = 4.457 \hbar\omega_0, \quad \epsilon_6 - \epsilon_0 = 5.218 \hbar\omega_0.$$

图 1 为当加一 $E_0=0.02$ au 的连续激光场时, 从 0 态到第 1, 2, 4, 6 激发态跃迁概率随频率 ω_l 变化曲线. 在 $t=0 \rightarrow 5 \times 10^4$ 范围内每隔 $\Delta t=100$ au 取计算点平均而得. 曲线上的峰即共振跃迁峰. 由图 1 知, 第 1 激发态跃迁概率 P_1 有两个峰, 峰值分别为 $\omega_{r1}=0.9420 \omega_0$, $1.0050 \omega_0$; 第 2 激发态跃迁概率 P_2 同样对应两个峰, 峰值分别为 $\omega_{r2}=0.9030 \omega_0$, $0.9460 \omega_0$; 第 4 激发态跃迁概率 P_4 对应的峰值约为 $\omega_{n4}=0.820 \omega_0$, 峰宽约为 $0.030 \omega_0$; 第 6 激发态跃迁概率 P_6 对应的峰值为 $\omega_{n6}=0.722 \omega_0$. 所以根据(45)式, P_1 对应的跃迁为单光子共振跃迁; P_2 对应的跃迁为双光子共振跃迁; P_4 对应的跃迁为近 4 光子或 5 光子共振跃迁; P_6 对应的跃迁为 7 光子共振跃迁.

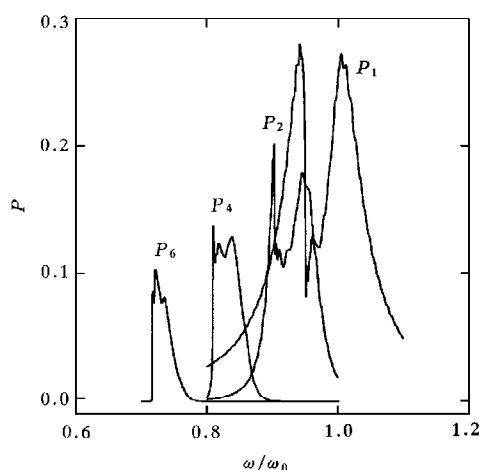


图 1 $E_0=0.02$ au 时第 1, 2, 4, 6 激发态跃迁概率 P_1 , P_2 , P_4 , P_6 随激光场频率变化曲线

仔细研究可以发现, 随着能态的增高, 各级共振频率越来越小, 说明能级间隔越来越小, 这与非谐性振子的能级分布特性是相符的^[7].

3.2 平均吸收能量随时间变化关系

图 2 给出了 $E_0=0.02$ au, $\omega_{r1}=1.0050 \omega_0$ (单光子共振跃迁) 和 $\omega_{n6}=0.722 \omega_0$ (7 光子共振跃迁) 情况下平均吸收能量 $\bar{\epsilon}(t)$ 随时间变化关系曲线. 图 2 显示, 单光子情形下, 平均能量为周期性振荡曲线, 振幅较小, 即分子吸收能量较少. 而多光子情况下, 能量呈脉冲

周期振荡, 周期约为 1.9×10^5 au, 振幅较大.

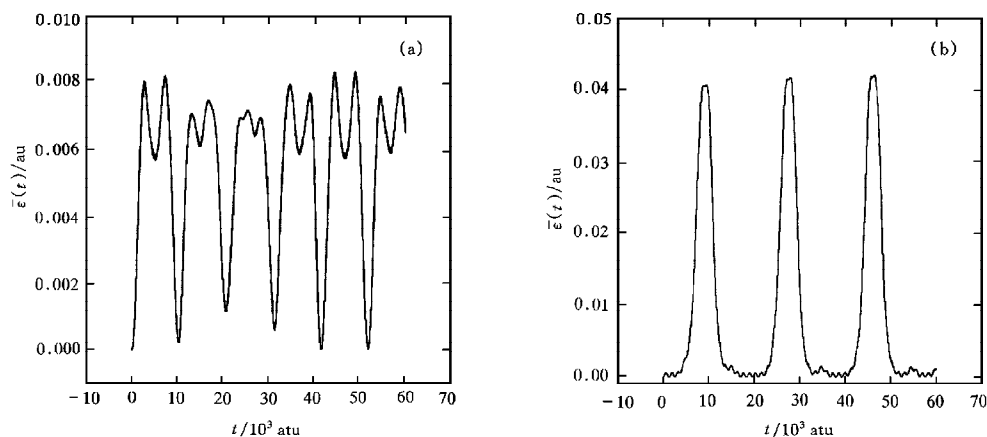


图2 $E_0 = 0.02$ au 时平均吸收能量随时间变化曲线 (a) 为 $\omega_1 = \omega_{r1} = 1.0050 \omega_0$ 时单光子共振跃迁, (b) 为 $\omega_1 = \omega_6 = 0.722 \omega_0$ 时 7 光子共振跃迁

3.3 脉冲调频激光场中跃迁概率

图 3 为加脉冲调频激光场时对第 4 和第 6 激发态进行选择激发的计算结果. 脉冲激

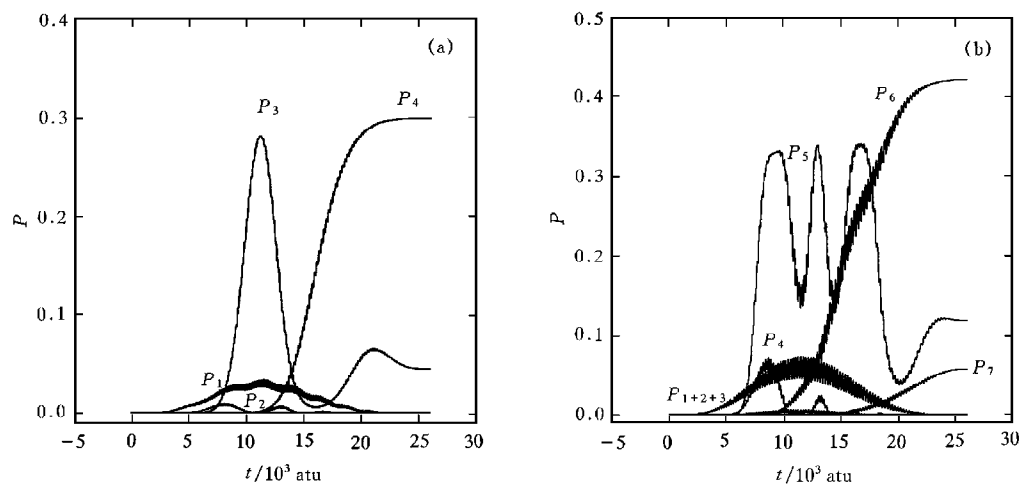


图3 对第 4 和第 6 激发态进行选择激发的计算结果 (a) 为 $E_0 = 0.02$ au, $\Delta\omega_1 = 0.086 \omega_0$, $\Delta\omega_2 = 0.820 \omega_0$, $\tau = t_p = 26000$ au 条件下第 1, 2, 3, 4 激发态跃迁概率曲线. 在 $t_p = 26000$ au 处第 4 激发态跃迁概率达到 30%. (b) 为 $E_0 = 0.056$ au, $\Delta\omega_1 = 0.135 \omega_0$, $\Delta\omega_2 = 0.690 \omega_0$, $\tau = t_p = 26000$ au 条件下第 4, 5, 6, 7 和 1+2+3 激发态跃迁概率曲线. 在 $t_p = 26000$ au 处第 4 激发态跃迁概率达到 42.4%

光场强为 $E(t) = E_0 \cos(\omega_1 t) \sin^2(\pi t / t_p)$, t_p 为脉冲宽度. 调频激光频率 $\omega_1 = \Delta\omega_1 e^{-(t/\tau)^2} + \Delta\omega_2$.

我们在参数为 $E_0 = 0.02$ au, $\Delta\omega_1 = 0.086\omega_0$, $\Delta\omega_2 = 0.820\omega_0$, $\tau = t_p = 26000$ au 条件下对第 4 激发态进行选择激发. 图 3(a) 中 P_1, P_2, P_3, P_4, P_5 表示在此条件下向第 1, 2, 3, 4, 5 激发态跃迁概率随时间变化曲线; 图 3(b) 是 $E_0 = 0.056$ au, $\Delta\omega_1 = 0.135\omega_0$, $\Delta\omega_2 = 0.690\omega_0$, $\tau = t_p = 26000$ au 时对第 6 激发态进行选择激发的跃迁概率曲线. 图 3 中用 P_7, P_6, P_5, P_4 及 P_{1+2+3} 表示向第 7, 6, 5, 4 及 1+2+3 激发态跃迁概率曲线. 可以看出在脉冲末 $t_p = 26000$ au 时, 图 3(a) 中目标态第 4 激发态的跃迁概率曲线呈指数上升, $P_4(t_p) \approx 0.30$; 而其他激发态跃迁概率则迅速下降, 实现了在脉冲末对第 4 激发态的选择跃迁. 图 3(b) 中目标态第 6 激发态的跃迁概率曲线同样呈指数上升, $P_6(t_p) \approx 0.424$; 其他激发态跃迁概率呈迅速下降趋势, 同样实现了对第 6 激发态的选择跃迁. 以上结果表明, 对目标态 $v=4$ 和 $v=6$ 的选择激发是非常有效的.

- [1] R. D. Levine, *Chem. Phys. Lett.*, **95**(2)(1983), 87.
- [2] P. W. Atkins, *Molecular Quantum Mechanics*(Oxford University Press, Oxford, New York, 1983), p. 287.
- [3] S. Chelkowski, A. D. Bandrank, *Phys. Rev. Lett.*, **65**(1990), 2355.
- [4] Y. Alhassid, R. D. Levine, *Phys. Rev.*, **18**(1977), 89.
- [5] M. E. Goggin, P. W. Milonni, *Phys. Rev.*, **37**(1988), 796.
- [6] R. B. Walker, R. K. Preston, *J. Chem. Phys.*, **67**(1977), 2017.
- [7] W. Jakubetz, B. Just, J. Manz, *J. Phys. Chem.*, **94**(1990), 2294.

STUDY OF MULTIPHOTON SELECTIVE EXCITATION OF DIATOMIC MOLECULES IN INTENSE LASER FIELDS BY USING THE QUADRATIC ANHARMONIC MODEL *

DAI YING¹⁾ DING SHI-LIANG¹⁾²⁾

1)(*Department of Chemistry, Shandong University, Jinan 250100*)

2)(*Department of Physics, Shandong Normal University, Jinan 250014*)

(Received 27 August 1997; revised manuscript received 3 November 1997)

ABSTRACT

In this letter, we use the quadratic algebraic Hamiltonian that represents a non-rotating Morse oscillator to study the state-selective excitation of a diatomic molecule placed in the intense laser field of an infrared laser. The selective transition probabilities of HF molecule and the averaged absorb energies are calculated.

PACC: 3380; 0210

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China, the State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry of Jilin University, and the Natural Science Foundation of Shandong Province, China.