

以两种方法研究强激光场中的非时序双电离现象*

魏雅娜 杨世平[†]

(河北师范大学物理科学与信息工程学院, 石家庄 050016)

(2009 年 12 月 28 日收到; 2010 年 4 月 21 日收到修改稿)

以半经典再散射模型和量子 S 矩阵模型出发来研究强激光场中原子和分子的非时序双电离现象. 分别利用这两个模型计算了电离率随激光强度的变化、反冲离子的动量分布、两出射电子的能量分布. 数值结果表明半经典再散射模型和量子 S 矩阵模型在研究强场中原子和分子的非时序双电离现象时有很好的—致性.

关键词: 非时序双电离, 半经典再散射模型, 量子 S 矩阵模型

PACC: 3410, 3480D, 3480G

1. 引 言

随着激光器的发展, 目前实验室已经可以获得激光强度超过 $1.0 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, 脉宽为飞秒量级的超短超强的脉冲. 这为研究强激光场中原子和分子的动力学行为提供了一个有效的工具. 我们将强激光场作用到原子和分子上, 出现了多光子电离、高次谐波^[1,2]、阈上电离、非时序双电离等新奇的物理现象. 时序电离是指发生双电离的两个电子按照次序在一个电子电离之后另一个电子才发生电离, 两个电离的电子之间没有任何联系. 然而, 非时序双电离是考虑了两电子之间关联的电离机理. 它的发现成功地解释了人们在实验上观测到的氦原子第二个电子电离概率的实验值比单电子近似理论 (single-active-electron approximation, SAEA) 预测值高出几个数量级^[3]的现象, 这是时序电离所无法解释的实验现象.

2. 两个理论模型

自从人们发现非时序双电离现象以来, 理论工作者们都为寻找其物理本质做着不懈的努力. 在他们提出的模型中, 以半经典再散射模型和量子 S 矩阵模型尤为典型.

2.1. 半经典再散射模型

半经典再散射模型认为原子或分子中的一个电子在强激光场的作用下发生隧穿电离, 当激光场的相位反转时, 已电离的电子被反向驱动回到母离子附近并与其发生碰撞, 实现双电子电离.

半经典的计算方法是利用 ADK 隧穿理论计算出第一个电子 (隧穿电子) 的电离概率, 并将其作为该电子的经典轨道权重. 第一个电子隧穿电离后, 两电子在库仑场和外电场的作用下作经典运动, 我们根据它们的能量来判断是否发生电离.

2.1.1. 电子的经典轨道权重

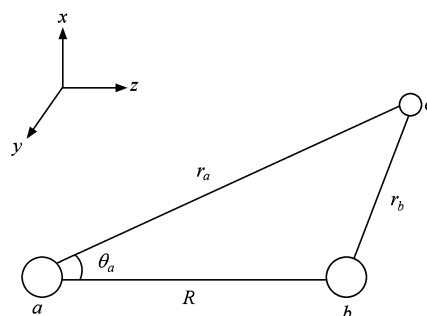


图 1 椭球坐标系与分子取向的关系图

采用以核 a 和核 b 为焦点的共轴旋转椭球坐标系 (ξ, η, φ) , φ 为绕分子轴的转角, 令

* 河北省自然科学基金 (批准号: A2008000136) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: yangship@mail.hebtu.edu.cn

$$r_a = \frac{R}{2}(\xi + \eta), \quad r_b = \frac{R}{2}(\xi - \eta)$$

可以得到强激光场中 X_2^+ 的 Hamilton 为

$$H = -\frac{1}{2}\Delta - \frac{4\xi}{R(\xi^2 - \eta^2)} + \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r}, \quad (1)$$

其薛定谔方程为

$$\left(\frac{1}{2}\Delta + \frac{4\xi}{R(\xi^2 - \eta^2)} + E - \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r} \right) \psi = 0, \quad (2)$$

假定外电场在 x - z 平面上, θ 是外电场与分子取向之间的夹角, 则

$$\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{r} = \frac{\varepsilon R}{2} [\sin\theta \cos\varphi ((\xi^2 - 1)(1 - \eta^2))^{1/2} + \xi\eta \cos\theta]. \quad (3)$$

在前线轨道理论中, 最高占据的分子轨道同原子中的价电子一样具有较高的活性. 在激光场与分子相互作用时, 起作用的也是这个轨道. 所以, 最高占据轨道对电子的电离有影响. 考虑到氢分子和氮分子的最高占据轨道都是 σ_g , 且它们具有相似的核间距, 这使得氢分子和氮分子的电离能具有相似性. 所以, 我们选取氢原子和氮原子的波函数分别为

$$\phi_H = \frac{\kappa^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\kappa r_a}, \quad \phi_N = \frac{\kappa'^{5/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\kappa' r_a} \cos\theta_a,$$

则 H_2^+ 和 N_2^+ 的波函数分别为

$$\begin{aligned} \Phi_H &= \frac{1}{\sqrt{2(1+s)}} \frac{\kappa^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\kappa R_H}{2}\xi} 2 \cosh\left(\frac{\kappa R_H \eta}{2}\right), \\ \Phi_N &= \frac{\kappa'^{5/2} R_N}{\sqrt{2\pi(1+s')}} e^{-\kappa' R_N \xi/2} \\ &\quad \times [\xi\eta \cosh(\kappa' R_N \eta/2) + \sinh(\kappa' R_N \eta/2)], \end{aligned} \quad (4)$$

其中, κ 和 κ' 是利用变分法出现的参数, s 和 s' 表示重叠积分, R_H 和 R_N 表示氢分子和氮分子的核间距.

因此, 我们可以得到氢分子^[4]和氮分子的电离率分别为

$$\begin{aligned} W_H &= \frac{16c_1^2 (2I_{p1})^{5/2}}{\varepsilon^2} e^{-\kappa R_H} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^1 \cosh^2\left(\frac{\kappa R_H \eta}{2}\right) \\ &\quad \times \frac{\eta d\eta}{[(1-\eta^2)^{1/2} \sin\theta \cos\varphi + \eta \cos\theta]^2} \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{2}{3\varepsilon} \frac{(2I_{p1})^{3/2}}{\sin\theta \cos\varphi (1-\eta^2)^{1/2} + \eta \cos\theta}\right), \\ W_N &= \frac{16c^2 (2I'_{p1})^{5/2}}{\varepsilon^2} e^{-\kappa' R_N} \frac{R_N^2}{4} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^1 \\ &\quad \times [\eta \cosh(\kappa' R_N \eta/2) + \sinh(\kappa' R_N \eta/2)]^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\times \frac{\eta d\eta}{[(1-\eta^2)^{1/2} \sin\theta \cos\varphi + \eta \cos\theta]^2} \\ &\times \exp\left(-\frac{2}{3\varepsilon} \frac{(2I'_{p1})^{3/2}}{\sin\theta \cos\varphi (1-\eta^2)^{1/2} + \eta \cos\theta}\right), \end{aligned} \quad (5)$$

其中, $c_1 = \frac{1}{\sqrt{2(1+s)}} \frac{\kappa^{3/2}}{\sqrt{\pi}}$, $c = \frac{\kappa'^{5/2}}{\sqrt{2\pi(1+s')}}$, I_{p1} 和 I'_{p1} 分别为氢分子和氮分子的电离能. 这样, 我们就得到了电子的经典轨道权重.

2.1.2. 经典的牛顿方程

在第一个电子隧穿电离后, 两个电子的演化由经典的牛顿方程描述为

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \boldsymbol{\varepsilon}(t) - \nabla_{\mathbf{r}_i} (V_{ne}^i + V_{ee}), \quad (6)$$

外加电场可以表示为 $\boldsymbol{\varepsilon}(t) = (\varepsilon(t) \sin\theta, 0, \varepsilon(t) \cos\theta)$, 外电场是随时间变化的, 其形式为 $\varepsilon(t) = \varepsilon \cos(\omega t)$. 指标 $i = 1, 2$ 分别代表隧穿电子和束缚电子. 两个电子所受的原子核库仑势和电子之间相互作用势分别为

$$V_{ne}^i = -\frac{1}{r_{ai}} - \frac{1}{r_{bi}}, \quad (7)$$

$$V_{ee} = \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (8)$$

其中, 半径 r_{ai} 和 r_{bi} 分别表示隧穿电子和束缚电子与两个原子核 a 和 b 之间的距离. 我们通过两电子的能量判断其是否发生电离.

2.2. 量子 S 矩阵模型

在强激光场中, 双原子分子的薛定谔方程可以表示为

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi = [H_0 + V_{Ae}(t) + V_{ee}] \psi, \quad (9)$$

其中, H_0 是不受微扰的系统哈密顿, $V_{Ae}(t)$ 表示激光与电子之间的相互作用, V_{ee} 表示两电子之间的相互作用. $V_{Ae}(t)$ 和 V_{ee} 分别为

$$\begin{aligned} V_{Ae}(t) &= \sum_{i=1,2} \left(-\bar{p}_i \cdot \mathbf{A}(t) + \frac{A^2(t)}{2} \right), \\ V_{ee} &= \frac{1}{r_{12}}, \end{aligned} \quad (10)$$

在(10)式中, $i = 1, 2$ 表示两电子. 由方程(9)得到

$$\begin{cases} \left(i \frac{\partial}{\partial t} - H_0 - V_{Ae}(t) \right) \psi_A = 0, \\ \left(i \frac{\partial}{\partial t} - H_0 - V_{ee}(t) \right) \psi_B = 0, \end{cases} \quad (11)$$

则末态可以表示为

$$\psi_f^{(-)}(t') = \psi_{Af}(t')$$

$$\begin{aligned}
& + \int dt'' G_A^{(-)}(t', t'') V_{ee}(t'') \psi_f^{(-)}(t''), \\
\psi_f^{(-)}(t) & = \psi_{Bi}(t) \\
& + \int dt' G_B^{(-)}(t, t') V_{Ae}(t') \psi_f^{(-)}(t'), \quad (12)
\end{aligned}$$

其中

$$G_A^{(-)}(t, t') = i\theta(t' - t) \sum_j |\psi_{Aj}(t)\rangle \langle \psi_{Aj}(t')|.$$

跃迁矩阵 S 可以表示为

$$S_{fi} = \lim_{t \rightarrow -\infty} \langle \psi_f^{(-)}(t) | \psi_{Bi}(t) \rangle, \quad (13)$$

其中, i, f 分别表示系统的初态和末态. $|S_{fi}|^2$ 表示电子发生电离的概率.

将(12)代入(13)式,可以得到

$$\begin{aligned}
& (S - 1)_{fi} \\
& = -i \int dt' \langle \psi_{Af}(t') | V_{Ae}(t') | \psi_{Bi}(t') \rangle \\
& - \sum_j \iint dt'' dt' \langle \psi_f^{(-)}(t'') | V_{ee}(t'') | \psi_{Aj}(t'') \rangle \\
& \times \langle \psi_{Aj}(t') | V_{Ae}(t') | \psi_{Bi}(t') \rangle \theta(t'' - t'), \quad (14)
\end{aligned}$$

其中,第二项体现了非时序双电离过程.因为在(14)式的第二项中既存在两电子之间的相互作用项又存在激光与电子之间的相互作用项.

由玻恩近似理论我们可以得到系统的波函数为电子和核的波函数的乘积.我们就可以得到初态、中间态、末态的波函数分别为^[5]

$$\begin{aligned}
\psi_{Bi}(t) & = \exp(-iE_{n_1 n_2 v} t) \Gamma_{n_1 n_2 v}(R) \\
& \times \Phi_{n_2}(\mathbf{r}_2, R) \Phi_{n_1}(\mathbf{r}_1, R), \\
\psi_{Aj}(t) & = \exp(-iE_{n_2 v'} t) \Gamma_{n_2 v'}(R) \\
& \times \Phi_{n_2}(\mathbf{r}_2, R) \varphi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}, t), \\
\psi_{Bf}(t) & = \exp(-iE_{n'' v''} t) \Gamma_{n'' v''}(R) \\
& \times \varphi(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2, t) \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1, t), \quad (15)
\end{aligned}$$

其中, $E_{n_1 n_2 v}, E_{n_2 v'}, E_{n'' v''}$ 和 $\Gamma_{n_1 n_2 v}(R), \Gamma_{n_2 v'}(R), \Gamma_{n'' v''}(R)$ 分别为 X_2, X_2^+ 和 X_2^{2+} 的束缚能和核的波函数.

$$\varphi_A(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \exp\left(-i \frac{p^2}{2} t - i \int V_{Ae}(\mathbf{p}, \boldsymbol{\tau}) d\boldsymbol{\tau}\right),$$

$$\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \varphi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \exp\left(-i \frac{p^2}{2} t\right),$$

$$A(t) = A_0 \varepsilon \cos(\omega t).$$

其中, $\varphi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{V^{1/2}} \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r})$, V 为归一化体积, R 为核间距.

将(15)式代入(14)式的第二项.我们假定核的

质量足够大,核间距 R 在整个计算的过程中不发生变化,所以 $\Gamma_{n_1 n_2 v}(R), \Gamma_{n_2 v'}(R), \Gamma_{n'' v''}(R)$ 积分后消失.经过计算,可以得到非时序双电离率为

$$\begin{aligned}
W' & = \frac{V^2}{(2\pi)^6} \iint d\mathbf{p}_1 d\mathbf{p}_2 w, \\
w & = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} |(S - 1)_{fi}|^2 \\
& = 2\pi \sum_{N=N_0} \delta\left(\frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2} + E_{n'' v''} - E_{n_1 n_2 v} - N\omega\right) \\
& \times |T^{(N)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2)|^2. \quad (16)
\end{aligned}$$

在上式中利用了 $\delta^2(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{t}{2\pi} \delta(x)$. 其中,

$$\begin{aligned}
& T^{(N)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2) \\
& = \frac{V \cdot (E_{n_1 n_2 v} - E_{n_2 v'} - p^2/2)}{(2\pi)^3} \\
& \times \int d\mathbf{p} \sum_m \langle \varphi(\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2) \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1) | V_{ee} | \\
& \times \Phi_{n_2}(\mathbf{r}_2, R) \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}) \rangle \\
& \times \langle \Phi_{n_2}(\mathbf{r}_2, R) \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}) | \Phi_{n_2}(\mathbf{r}_2, R) \Phi_{n_1}(\mathbf{r}_1, R) \rangle \\
& \times \frac{J_m(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}, \boldsymbol{\eta}) J_{m-N}(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}, \boldsymbol{\eta})}{p^2/2 + U_p + E_{n_2 v'} - E_{n_1 n_2 v} - m\omega}.
\end{aligned}$$

这就是利用量子 S 矩阵理论求得的非时序双电离率.

对于基态氮分子^[5],第一个电子的波函数可以表示为

$$\begin{aligned}
\Phi_{n_1}(\mathbf{r}_1, R) & = \frac{1}{\sqrt{2[1 - s_j^{(n_1)}(R)]}} \\
& \times \left[\phi_j\left(\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2}\right) - \phi_j\left(\mathbf{r}_1 - \frac{\mathbf{R}}{2}\right) \right], \\
\phi_j\left(\mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{R}}{2}\right) & = (k_2)^{5/2} \frac{r_{a1}}{\sqrt{\pi}} \exp(-k_2 r_{a1}) \cos\theta_R.
\end{aligned}$$

第二个电子的波函数为

$$\begin{aligned}
\Phi_{n_2}(\mathbf{r}_2, R) & = \frac{1}{\sqrt{2[1 + s_l^{(n_2)}(R)]}} \\
& \times \left[\phi_l\left(\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2}\right) + \phi_l\left(\mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2}\right) \right], \\
\phi_l\left(\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2}\right) & = (k'_2)^{5/2} \frac{r_{a2}}{\sqrt{\pi}} \exp(-k'_2 r_{a2}) \sin\theta_R \cos\varphi_R.
\end{aligned}$$

N_2^+ 的波函数为

$$\begin{aligned}
\Phi_{n_2}(\mathbf{r}_2, R) & = \frac{1}{\sqrt{2[1 + s_m^{(n_2)}(R)]}} \\
& \times \left[\phi_m\left(\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2}\right) + \phi_m\left(\mathbf{r}_2 - \frac{\mathbf{R}}{2}\right) \right],
\end{aligned}$$

$$\phi_m\left(\mathbf{r}_2 + \frac{\mathbf{R}}{2}\right) = (k_2'')^{5/2} \frac{r_{a2}}{\sqrt{\pi}} \exp(-k_2'' r_{a2}) \sin\theta_R \cos\varphi_R,$$

其中 $k_2^2/2 = I_{p1}'$, $k_2'^2/2 = I_{p1}'^{(1\pi_u)}$, $k_2''^2/2 = I_{p2}'$.

3. 数值模拟和分析

在了解了两个模型之后,我们就可以研究基于两个模型讨论的非时序双电离现象. 参数选取为: 氦原子的电离能为 0.9 a. u., He^+ 的电离能是 2.0 a. u.. 氩原子的电离能是 0.5794 a. u., Ar^+ 的电离能是 1.0158 a. u.. 氧分子的最高占据轨道是 π_g , 氧分子的电离能是 0.4438 a. u., O_2^+ 的电离能是 0.8875 a. u.. 氢分子的电离能 $I_{p1} = 0.5684$ a. u., H_2^+ 的电离能 $I_{p2} = 1.10325$ a. u.. 氮分子的电离能 $I_{p1}' = 0.5728$ a. u., $I_{p1}'^{(1\pi_u)} = 0.6276$ a. u., N_2^+ 的电离能 $I_{p2}' = 0.9989$ a. u.. 氢分子和氮分子的核间距分别为 $R_H = 2.0$ a. u. 和 $R_N = 2.079$ a. u., 激光频率 $\omega = 0.05695$ a. u..

3.1. “knee”现象

激光强度为 10^{14} W/cm^2 — 10^{15} W/cm^2 时, 氦原子第二个电子电离概率的实验值比单电子近似理论(SAEA)预测值高出几个数量级^[6], 如图 2 所示. 这个实验结果使人们认识到: 当激光强度达到一定值时, 我们应该考虑两电子之间的相互作用对电子电离的影响. 简单的利用单电子近似理论已经不能够解释这个强度下的双电子电离. 从图 2 中我们可以明显地看到利用单电子近似理论得到的氦原子离子双电离的产量明显小于实验上得到的氦原子离子双电离的产量, 出现了“knee”现象(图 2 中箭头处).

图 3 给出了由半经典再散射模型和量子 S 矩阵

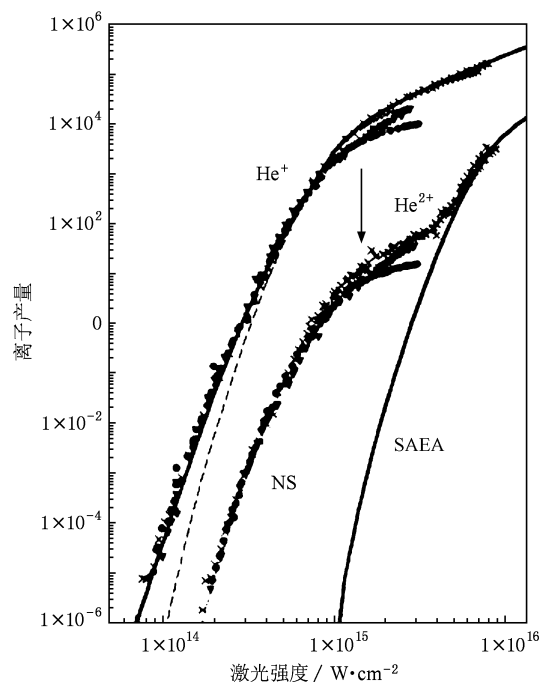


图 2 氦原子离子产量随激光强度的变化^[3]. 激光脉冲的波长为 780 nm

模型得到的氮分子的非时序双电离率随激光强度的变化. 在图 3(a)中, 随着激光强度的增强, 氮分子的非时序双电离率增加. 在图 3(a)中箭头处出现一个拐点, 这与图 2 中氦原子的相似. 在图 3(b)中, 也可以看到这个现象. 比较图 3(a)和图 3(b), 我们可以发现, 虽然两个图所采用的坐标尺度和随机初始点的数目不同, 但是两个图形的分布相符合, 并且与图 2 中氦原子的分布相似. 因此, 无论用经典的观点还是量子的观点研究非时序双电离过程都是有意义的. 完全放弃经典的观点或是量子的观点都是不科学的.

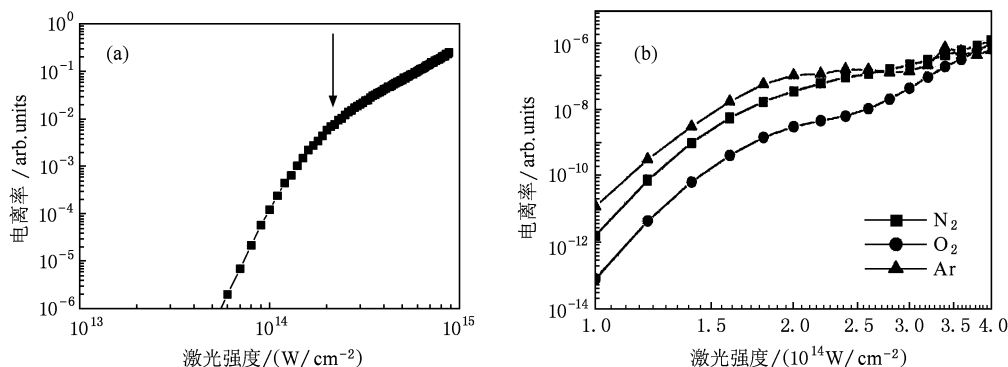


图 3 氮分子的非时序双电离率随激光强度的变化 (a) 半经典再散射模型; (b) 量子 S 矩阵模型^[5]

3.2. 电离率随分子取向与电场方向的夹角 θ 的变化

为了进一步研究非时序双电离现象,图4给出了由两个模型得到的氮分子的电离率随 θ 的变化关系图,其中图4(a)是我们得到的结果,图4(b)是文献[5]中的结果.我们发现图4(a)和图4(b)中的电离率随着 θ 的增加而减小. $\theta = 90^\circ$ 时的电离率比 $\theta = 0^\circ$ 时的电离率大.这说明利用两个模型研究电离率随 θ 的变化时能够得到一致的结果.将两个图形

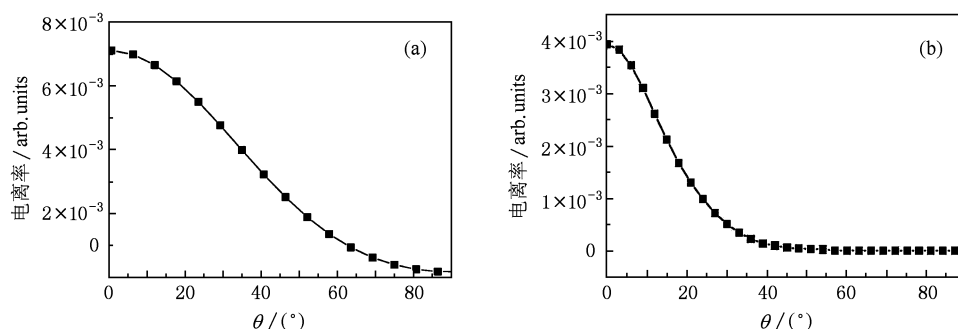


图4 氮分子的电离率随 θ 的变化 (a)半经典再散射模型;(b)量子S矩阵模型^[5](激光强度为 $2 \times 10^4 \text{ W/cm}^2$, 波长为800 nm)

经过上面的分析,我们发现无论用半经典再散射模型还是量子S矩阵模型研究电离率随 θ 的变化都能够得到一致的结果.这充分表明两个模型对于非时序双电离现象理论研究的正确意义.既然如此,我们利用这两个模型来研究一下在非时序双电离过程中原子和分子反冲离子的动量分布和两出射电子的能量分布.

3.3. 氮原子反冲离子的动量分布和两出射电子的能量分布

要想得到反冲离子的动量,我们可以利用动量守恒定律,先求得两出射电子的动量和,然后取其相反数即可.图5和图6分别给出了由半经典再散射模型和量子S矩阵模型得到的氮原子反冲离子的动量分布.观察图5(a)和图6(a),我们可以看出,当反冲离子的动量分布平行于极化轴(电场方向)时,动量分布呈现双峰分布.然而,当反冲离子的动量分布垂直于极化轴时,动量分布呈现出零值附近的单峰分布(如图5(b)和图6(b)).这个比较说明,反冲离子动量分布与极化轴所成的角度不同时,动量分布所呈现的图形是不同的.同时,图5和图6也说明,利用半经典再散射模型和量子S矩阵模型研究氮原子反冲离子的动量分布时可以得到很好的

相比较,我们也可以看出,随着 θ 的增加,由半经典再散射模型得到的电离率分布比由量子S矩阵模型得到的电离率分布减小的慢.在 $\theta = 45^\circ$ 时,由半经典再散射模型得到的电离率大于零而由量子S矩阵模型得到的电离率趋近于零.导致两个模型得到的结果有差别的原因是由于半经典再散射模型忽略了非时序双电离过程中的量子效应,以经典的观点研究问题.

一致性.

对于反冲离子动量为零的分布,电离时两出射电子的动量方向相反.反之,对于反冲离子动量为非零分布,两出射电子的动量方向有一定的夹角或者方向相同.可以根据文献[7]中提到的双电离方式来解释这一现象.根据双电离过程,将双电离划分为碰撞电离和碰撞-激发电离两种形式.在发生碰撞电离的双电离事件中,由于激光场的周期驱动作用,隧穿电子返回到母离子附近并与其发生碰撞,直接将束缚电子电离.所以,发生碰撞电离的两电子的动量方向相同.对于发生碰撞-激发电离的双电离事件,返回的隧穿电子不能将束缚电子电离,而是把它激发到一个较高的激发态.大约经过半个周期或者更长的时间外电场将束缚电子电离,这时电场的相位反转.因此,发生碰撞-激发电离的两电子的动量方向相反^[7].从图5和图6中我们可以看出,反冲离子的动量分布平行于极化轴时的零动量分布明显小于反冲离子的动量分布垂直于极化轴时的零动量分布.这说明反冲离子的动量分布与极化轴所成的角度不同时,两出射电子动量间的夹角也会发生改变.动量和能量是两个不可分割的物理量,接下来我们研究两出射电子的能量分布.

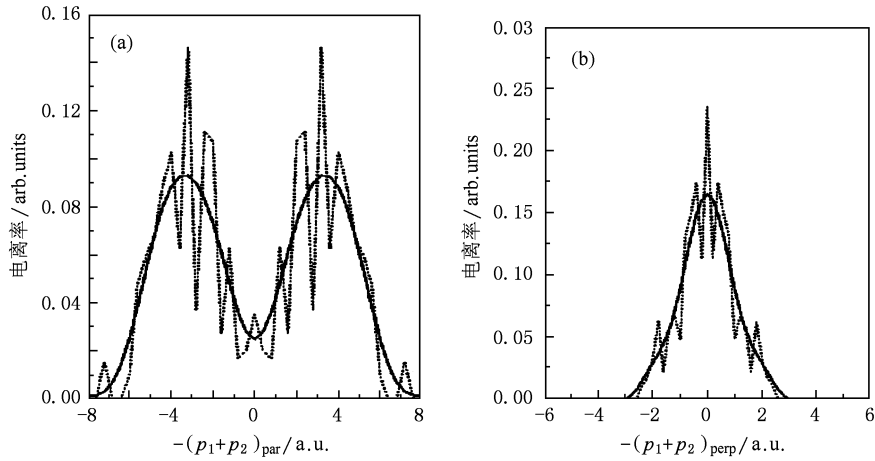


图5 半经典再散射模型得到的氦原子反冲离子的动量分布 (a)反冲离子的动量分布平行; (b)垂直于极化轴^[8] (激光强度为 $6.6 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, 波长为 800 nm)

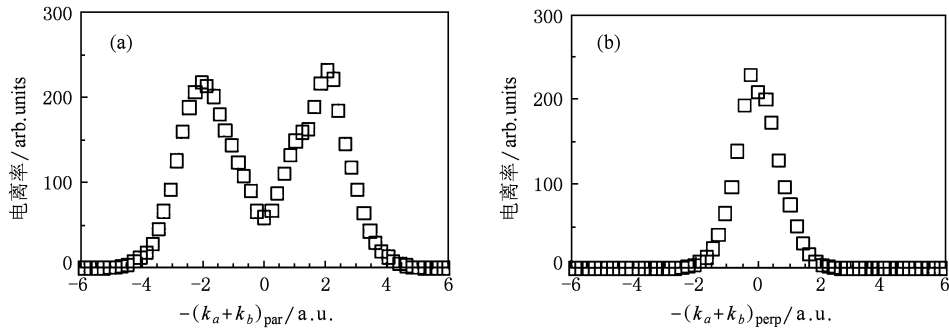


图6 量子 S 矩阵模型得到的氦原子反冲离子的动量分布 (a)反冲离子的动量分布平行; (b)垂直于极化轴^[9] (激光强度为 $6.6 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, 波长为 800 nm)

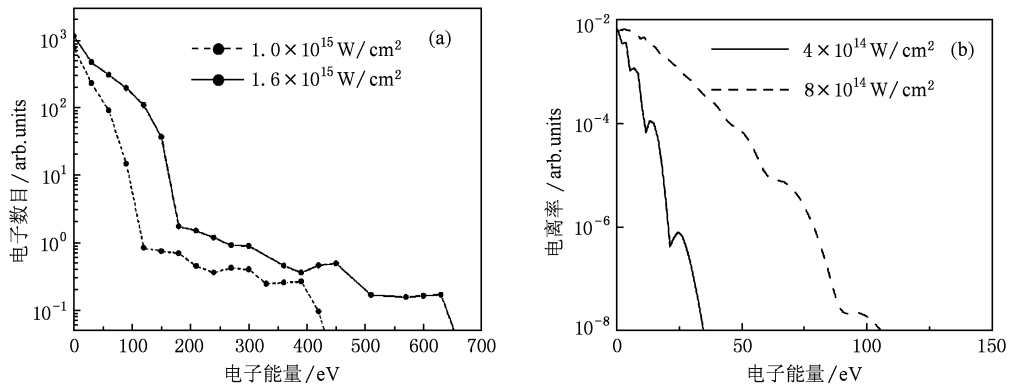


图7 氦原子两出射电子的能量分布 (a)半经典再散射模型^[10]; (b)量子 S 矩阵模型^[11] (激光脉冲的波长为 780 nm)

图7给出了利用上述两个模型得到的氦原子两出射电子的能量分布. 图7中的结果和我们所预测的一样,半经典再散射模型与量子 S 矩阵模型得到的能量分布相符合. 从图7中我们可以发现,两电子

的能量低时发生非时序双电离的概率大. 这说明大部分发生双电离的两出射电子所拥有的能量较小. 我们可以利用两种双电离方式(碰撞电离和碰撞-激发电离)来解释这一现象. 对于发生碰撞电离的两

电子来说,隧穿电子将束缚电子电离需要消耗很大的能量,所以电离时两电子所拥有的能量很小.对于碰撞-激发电离,隧穿电子将束缚电子激发到一个较高的激发态后,由激光场将束缚电子电离.在束缚电子被激光场电离的期间隧穿电子在外场中也获得了能量,所以发生碰撞-激发电离的两电子的能量较大.因此,图7所展现的“两出射电子的能量小时发生非时序双电离的概率大”的现象表明,在所有的双电离事件中,发生碰撞电离的双电离事件数要多于发生碰撞-激发电离的双电离事件数.而且,随着激光强度的增强,发生非时序双电离的概率增大,且两出射电子的能量向能量大的方向移动.

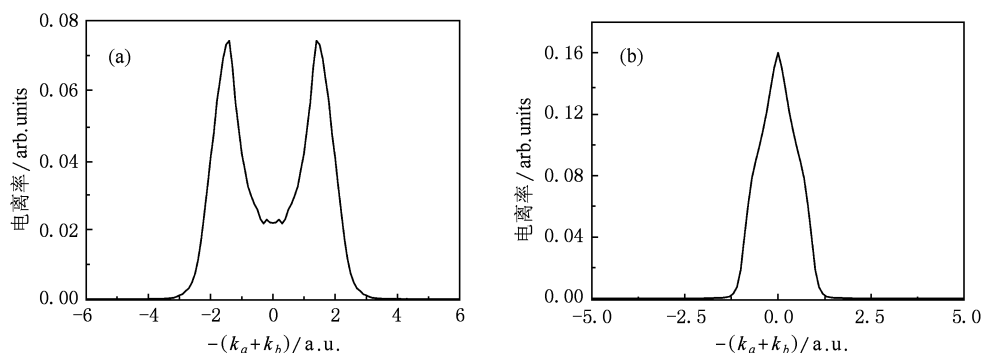


图8 氢分子反冲离子的动量分布 (a)分子取向平行;(b)垂直于极化轴(激光强度为 $3.0 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, 波长为 800 nm)

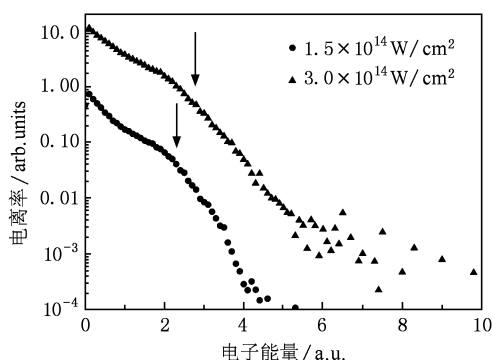


图9 氢分子两出射电子的能量分布 激光脉冲的波长为 800 nm

到,分子取向平行于极化轴时两出射电子动量方向相反的双电离事件数比分子取向垂直于极化轴时两出射电子动量方向相反的双电离事件数少,即分子取向平行于极化轴时发生碰撞-激发电离的双电离事件数比分子取向垂直于极化轴时发生碰撞-激发电离的双电离事件数少.这表明分子取向在非时

3.4. 半经典再散射模型在氢分子中的应用

在上面的讨论中,我们分别讨论了氦原子反冲离子的动量分布和两出射电子的能量分布.那么,对于自由度多的氢分子来说,反冲离子的动量分布和两出射电子的能量分布是什么样的呢?

在图8中,分别计算了氢分子取向平行和垂直于极化轴时反冲离子的动量分布.图8表现出和图5,图6相似的现象.当分子取向平行于极化轴时,反冲离子的动量分布呈现双峰结构;当分子取向垂直于极化轴时,反冲离子的动量分布呈现出与高斯分布相似的单峰结构.这些都与氦原子反冲离子的动量分布相似.经过上面的讨论,从图8中我们可以得

序双电离过程中起着重要的作用.分子取向是导致分子的自由度比原子的自由度多的原因.此外,我们还研究了氢分子两出射电子的能量分布,如图9所示.图9呈现出的氢分子两出射电子的能量分布与氦原子两出射电子的能量分布相似.当两出射电子的能量较小时,非时序双电离率较大并且出现“平台”结构.对于氢分子两出射电子的能量小时非时序双电离率大的现象,同样可以利用氦原子两出射电子的能量分布的分析方法来解释.此外,随着激光强度的增强,发生非时序双电离的概率明显增大,这个现象也同氦原子两出射电子的能量分布相似.

4. 结 论

本文利用半经典再散射模型和量子 S 矩阵模型研究强激光场中的非时序双电离现象.首先介绍了半经典再散射模型和量子 S 矩阵模型.其次,我们分

别利用两个模型研究了电离率随激光强度和 θ 的变化、反冲离子的动量分布、两出射电子的能量分布. 结果表明半经典再散射模型和量子 S 矩阵模型在研究强场中原子和分子的非时序双电离现象时有很好的-一致性. 但是, 两个模型得到的结果还存在着差别. 这个差别产生的原因是由于半经典再散射模

型虽然考虑了两电子之间的相互作用, 但是忽略了双电离过程中量子效应的影响, 以经典的观点研究非时序双电离现象. 总之, 通过两个模型对强激光场中非时序双电离现象的研究, 我们可以从经典和量子两个方面了解非时序双电离过程. 希望我们的结果对将来的实验有一定的帮助.

-
- [1] Guo Z H, Zhou X X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1616 (in Chinese) [郭中华、周效信 2008 物理学报 **57** 1616]
- [2] Zhao S F, Zhou X X, Jin C 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4078 (in Chinese) [赵松峰、周效信、金成 2006 物理学报 **55** 4078]
- [3] Walker B, Sheehy B, DiMauro L F, Agostini P, Schafer K J, Kulander K C 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 1227
- [4] Li Y, Chen J, Yang S P, Liu J 2007 *Phys. Rev. A* **76** 023401
- [5] Jia X Y, Li W D, Fan J, Liu J, Chen J 2008 *Phys. Rev. A* **77** 063407
- [6] Li H Y, Wang B B, Jiang H B, Chen J, Li X F, Liu J, Gong Q H, Fu P M 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 124 (in Chinese) [李洪云、王兵兵、蒋红兵、陈京、李晓峰、刘杰、龚旗煌、傅盘铭 2008 物理学报 **57** 124]
- [7] Liu J, Ye D F, Chen J, Liu X 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 013003
- [8] Chen J, Liu J, Fu L B, Zheng W M 2000 *Phys. Rev. A* **63** 011404(R)
- [9] Becker A, Faisal F H M 2001 *Opt. Express* **8** 383
- [10] Fu L B, Liu J, Chen J, Chen S G 2001 *Phys. Rev. A* **63** 043416
- [11] Becker A, Faisal F H M 2005 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** R1

Using two methods to study non-sequential double ionization*

Wei Ya-Na Yang Shi-Ping[†]

(Department of Physics, Hebei Normal University, Shijiazhuang 050016, China)

(Received 28 December 2009; revised manuscript received 21 April 2010)

Abstract

The semiclassical rescattering model and the quantum-mechanical S matrix model are used to study the non-sequential double ionization of atoms and molecules in strong laser fields. Based on these two models, we can calculate ionization rate with different laser intensities, recoil ions momentum distribution and two-electron energy distribution. The numerical simulation results show that the semiclassical rescattering model coincides with the quantum-mechanical S matrix model when non-sequential double ionization of atoms and molecules is researched in strong laser fields.

Keywords: non-sequential double ionization, semiclassical rescattering model, quantum-mechanical S matrix model

PACC: 3410, 3480D, 3480G

* Project supported by the Hebei Provincial Natural Science Foundation of China (Grant No. A2008000136).

[†] Corresponding author. E-mail: yangship@mail.hebtu.edu.cn