

# 超短强激光脉冲激励甲烷团簇的内电离机理<sup>\*</sup>

李洪玉<sup>1)†</sup> 刘建胜<sup>2)</sup>

1) (天津师范大学物理与电子信息学院, 天津 300387)

2) (中国科学院上海光学精密机械研究所强场激光物理国家重点实验室, 上海 201800)

(2009 年 9 月 20 日收到; 2010 年 3 月 28 日收到修改稿)

采用三维粒子动力学模拟方法研究了甲烷团簇在超短强激光脉冲激励下的爆炸动力学行为, 重点讨论了几种典型的内电离机理对团簇爆炸过程中离子的价态和动能的影响. 研究表明, 在激光脉冲强度比较小的情况下, 团簇中的原子主要是在光场作用下通过隧道电离的方式发生电离. 当激光场进一步增强时, 势垒压低电离是电离的主要方式. 在相同的较高激光强度下, 团簇更容易通过势垒压低电离达到高的电离价态. 团簇发生电离后, 其内部库仑电场的点火电离效应和内部滞留自由电子的碰撞电离效应也将增强团簇的再次电离过程.

**关键词:** 超短强激光脉冲, 甲烷团簇, 内电离

**PACC:** 3640J, 5250J

## 1. 引 言

近年来超强激光场与气体团簇之间的相互作用日益受到重视. 作为由几个乃至上万个原子、分子或离子通过相互间的物理或化学作用力结合起来的微观聚集体, 团簇可以看作是介于原子分子和宏观固体之间物质结构的新层次. 由于团簇兼有气体靶和固体靶的优点, 提高了团簇对激光能量的吸收效率<sup>[1,2]</sup>, 因此激光与团簇相互作用表现出不同于激光与气体和固体作用的特点, 并可以为强场下的很多物理过程提供优化条件, 由此衍生出两项极具前景的应用: 强激光照射惰性气体团簇产生的高温等离子体可以发射很强的 X 射线, 这为获得台式 X 射线激光提供了一种可能的思路<sup>[3,4]</sup>; 激光加热纯氖团簇及氖代团簇爆炸生成高速的氖核, 其具有的高能量足以有效地克服库仑排斥势垒而驱动氖核聚变<sup>[5-9]</sup>.

超短强激光与气体团簇相互作用主要包括三个亚过程: 原子的电离、激光能量的吸收和团簇膨胀<sup>[10-12]</sup>. 迄今为止, 关于这些过程发生和演化的确切机理并没有定论. 例如, 根据团簇与激光参数之间的关系, 激光与团簇相互作用的动力学过程

可以从粒子的和流体的角度进行描述. 粒子方法<sup>[8,13-16]</sup>主要是针对超强超短脉冲或小尺寸团簇的情况. 在这样的条件下, 团簇中的大部分电子被剥离团簇, 剩下带正电荷的离子云在静电排斥作用下发生库仑爆炸, 离子获得很高的动能. 流体方法<sup>[17,18]</sup>主要应用于被光强较弱的长脉冲激光激发的较大尺寸团簇, 这时由于集体效应发生电子加热. 由自由热电子的运动所导致的流体动力以及离子之间的库仑斥力共同驱动剩余的带正电的等离子体发生膨胀. 为了研究这些复杂的物理过程并解释实验上观测到的现象, 国内外研究者已经发展了多种理论模型, 如微等离子体模型<sup>[8]</sup>、分子动力学模型<sup>[11]</sup>、质点网格代码模型<sup>[13]</sup>、流体动力学模型<sup>[18]</sup>、电离点火模型<sup>[19]</sup>等. 然而由于激光与团簇相互作用的复杂性, 关于两者的相互作用机理还有很多未知的领域有待开拓, 理论模型也需要不断完善.

在本文中, 我们采用三维粒子动力学模拟方法研究甲烷团簇在脉冲强激光场中的爆炸动力学行为, 重点讨论了几种典型的电离机理(即隧道电离、势垒压低电离、内场点火电离和电子碰撞电离)对激光与团簇相互作用过程的影响.

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号:10674145,11005080),天津市高等学校科技发展基金计划(批准号:20090908),天津师范大学博士基金(批准号:52LX27)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: hongyuli79@gmail.com

## 2. 激光与团簇相互作用的粒子动力学模型

在强激光脉冲辐照下, 团簇的演化包含以下几个顺序实现的阶段: 首先在脉冲的上升沿, 团簇中的原子发生光场电离, 原子周围的束缚电子成为自由电子, 可以驱动后续的离子和电子的动力学行为. 这个过程亦称内电离, 决定着离子的电离态. 通过激光驱动的碰撞过程, 自由电子被加热, 从激光场中获得越来越多的能量. 那些具有较高能量且位于团簇外层的电子将会首先从团簇中逃逸, 此过程称为外电离. 如果电子的能量不足以克服团簇的正电势垒则只能留在团簇中. 外电离决定着团簇所带的净电荷总量. 带电团簇中的离子在库仑斥力作用下相互排斥, 团簇发生爆炸.

我们采用三维粒子动力学模拟方法, 认为在激光脉冲持续时间里, 团簇电离后其内部的所有离子和自由电子满足牛顿运动方程, 即

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i(\mathbf{r}_i, t)}{dt} = \sum_{j \neq i} \frac{q_i q_j e^2 (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)}{4\pi\epsilon_0 (|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^2 + \alpha)^{3/2}} + q_i e \mathbf{F}(t), \quad (1)$$

其中  $\mathbf{r}_i$  和  $\mathbf{v}_i$  分别表示在  $t$  时刻粒子 (离子和电子) 的膨胀速度和位移;  $q_i$  和  $m_i$  分别表示粒子的价态和静止质量;  $e$  是电子电量,  $\epsilon_0$  是真空介电常数;  $\mathbf{F}$  是激光脉冲的电场强度,  $\alpha$  是软化系数, 用以消除库仑场的奇异性<sup>[20]</sup>.

在模拟过程中我们采用的线偏振高斯型激光脉冲为

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_0 \exp\left(-2\ln 2 \frac{t^2}{\tau^2}\right) \sin(\omega t), \quad (2)$$

其中  $\mathbf{F}_0$ ,  $\tau$  和  $\omega$  分别是脉冲激光电场的振幅、半高全宽和激光振荡频率. 一般情况下, 团簇尺寸比激光波长小很多, 所以可认为团簇内的激光电场与空间坐标无关.

惰性气体团簇稳定的空间构型一般是多层正二十面体<sup>[21]</sup>. 在我们的模拟计算中, 假设甲烷团簇  $(\text{CH}_4)_n$  的几何结构也是这种构型. 每个甲烷分子里的碳原子分布在各层正二十面体的顶点. 在一个分子  $\text{CH}_4$  中, 碳碳间距为 0.44 nm, 碳氢间距为 0.109 nm<sup>[22]</sup>, 碳氢键夹角为 109.5°.

## 3. 内电离机理对离子价态和动能的影响

### 3.1. 团簇的不均匀膨胀

我们采用上述粒子动力学模型模拟了超短强激光脉冲激励下甲烷团簇的库仑爆炸过程. 当激光场在极短的时间内达到足够强度就可以剥离团簇内部的所有电子, 则甲烷团簇的爆炸过程可进一步简化为纯库仑爆炸 (pure coulomb explosion, PCE). 图 1 给出了  $(\text{CH}_4)_{147}$  团簇纯爆炸后 50 fs 的三维离子空间分布. 由图可见团簇膨胀是各向同性的, 较重的碳离子在内部空间均匀分布, 而较轻的大量质子超过了慢速膨胀的碳离子积聚在外层形成一个球壳. 由于质子的荷质比高于 +4 价的碳离子, 所以质子在赶超碳离子的过程中得到加速获得更高的动能. 这种赶超效应进一步导致在爆炸演化过程中形成了两个具有不同径向膨胀速度的子团簇. 这种空间上的不均匀膨胀现象是与我们在文献[23]中对超短强激光脉冲激励下氘代甲烷团簇库仑爆炸过程的研究结果相一致的.

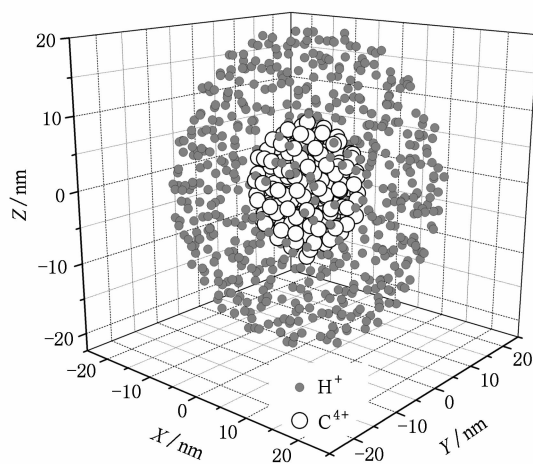


图 1  $(\text{CH}_4)_{147}$  纯库仑爆炸后 50 fs 的三维空间离子分布. 假设所有碳离子的价态都是 +4 价

在激光激发团簇演化的初期, 主要表现为团簇中的原子在光场作用下通过内电离产生带有一定电荷的离子, 团簇初步电离后, 其内部库仑场与外激光场共同作用可以使团簇内部的离子继续电离. 这个过程在很大程度上决定着团簇后续的动力学过程. 下文重点讨论几种典型的内电离机理对离子价态和终态动能的影响.

### 3.2. 隧道电离和势垒压低电离

本小节暂不考虑碰撞电离,主要讨论隧道电离和势垒压低电离机理对甲烷团簇爆炸产生碳离子的平均价态的影响,而这个指标从一定程度上可以反映两种电离机理对激光与团簇作用整个过程的影响.对于任意的原子,利用 ADK 隧道电离(tunnel ionization of ammosov, delone, and krainov, TI)速率公式<sup>[24]</sup>可以计算一个光周期内的光场电离速率,而根据势垒压低电离(barrier suppression ionization, BSI)模型<sup>[25]</sup>可以求出使束缚电子无需隧穿就可逃逸的临界电场.

图 2 给出了在  $2 \times 10^{16} \text{ W/cm}^2$  的低强度激光脉冲作用下,甲烷团簇  $(\text{CH}_4)_{923}$  中的碳离子平均价态的时间演化过程.模拟计算中都考虑了团簇电离后内部形成的库仑电场的影响.实线和虚线分别代表将 TI 和 BSI 作为团簇内电离的主要机理而计算的结果.尽管对于这里选定的激光和团簇参数,两种电离机理对碳离子的最终价态没有影响——都是电离到 +4 价,碳原子从中性电离到 +4 价所需的时间也相差不大,但是两种机理下碳离子平均价态随时间的变化关系还是有区别的.在 BSI 机理下,碳原子要比在 TI 机理下电离得更早,达到各对应价态分别提早了约 10 fs;而时间越早,对应的激光强度越小,也就是说电离碳原子到同一价态,BSI 机理所需的光强要小. Last 和 Jortner 在文献<sup>[26]</sup>中也对两种机理下的电离所需光强作了比较.我们引用该文献的图 1 作为本文的图 3,从图中看出,对某一种原子的某一特定价态,通过 BSI 机理发生电离达到这一价态要比 TI 机理所需的激光强度小,这是与我们给出的结论一致的.这从一个侧面说明:在激光脉冲强度比较小的情况下,主要是团簇中的原子在光场作用下通过隧道电离的方式发生电离;当激光场进一步增强时,势垒压低电离是原子/离子电离的主要方式,并且在相同的较高激光强度下,团簇更容易通过势垒压低电离达到高的电离价态.

然而团簇获得高的电离价态并不意味着最终离子动能就高,这还与离子价态的时间演化过程有关.通过比较发现,在两种电离机理下,碳离子各个平均价态的时间演化长短不同,导致了终态离子动能有一定差别.图 4 给出了与图 1 对应的碳离子和质子的终态能谱.为紧凑起见,图中碳离子的质量也用质子质量代替,相当于碳离子能量变为实际值

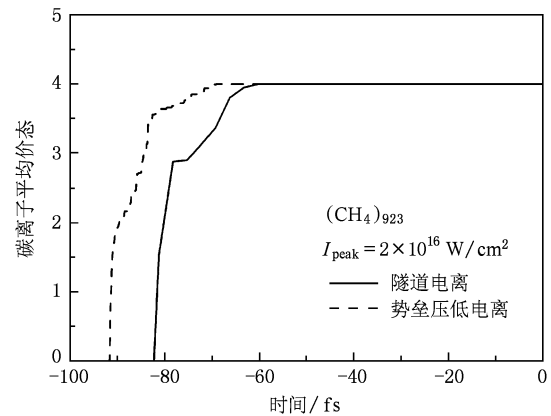


图 2 团簇  $(\text{CH}_4)_{923}$  碳离子平均价态的时间演化过程.时间零点对应激光脉冲的峰值光强为  $2 \times 10^{16} \text{ W/cm}^2$ ,脉宽为 65 fs,中心波长为 800 nm.实线和虚线分别代表粒子动力学模拟计算中将 TI 和 BSI 作为团簇内电离的主要机理

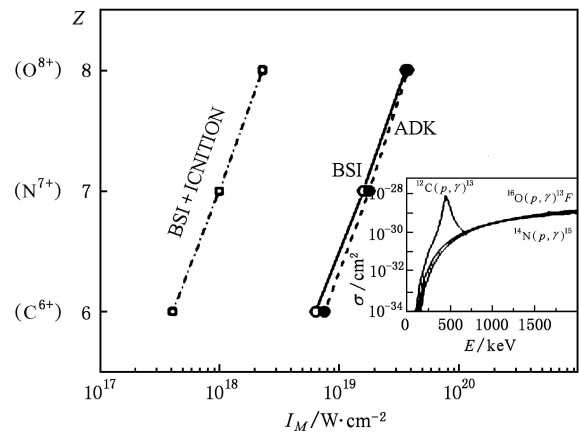


图 3 超强激光场中碳、氮和氧原子的电离价态.此图援引自文献<sup>[26]</sup>.空心圆和实心圆分别代表通过 BSI 和 ADK(TI)机理计算的单个原子电离所需的阈值光强.空心方框表示的是加入内场后采用 BSI 模型计算的半径为  $R_0^{(l)}$  的团簇内电离,标有“BSI + IGNITION”.内插图是核合成反应截面与能量的关系

的 1/12,主要分布在 0—600 eV 的能量范围内,质子主要分布在 600—2500 eV 的能量范围内. TI 机理对应的质子能量和碳离子能量要高于 BSI 机理对应的离子能量.对此可以结合图 2 进行分析,在 TI 机理下,碳从 0 价很快电离到 +3 价,这个过程中团簇还来不及膨胀,势必积累了较多的库仑势能,再从 +3 价电离到 +4 价,团簇发生膨胀,库仑势能转化为离子动能.但是在 BSI 机理下,碳从 0 价很快电离到 +2 价,从 +2 到 +3 价需要的时间较长,此时团簇开始膨胀.在相近团簇尺度的膨胀过程中,由于 BSI 机理下团簇膨胀开始前内部积累的正电荷总量不如

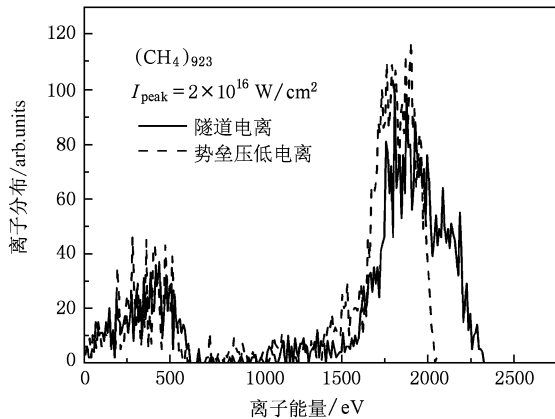


图4 与图2对应的离子能谱. 低能量离子分布对应碳离子(碳离子能量缩小为实际值的1/12), 高能量离子分布对应质子

TI 机理对应的多, 相应的库仑势能不如 TI 机理的高, 因此离子获得的动能也不如前者高. 在此后高价态离子电离过程中, 伴随团簇的膨胀, 离子继续电离使得正电荷总量增加从而增大库仑势能, 同时团簇膨胀使得半径增大又会减小库仑势能, 再次电离和团簇膨胀对库仑势能向离子动能的转化还有此消彼长的影响. 但这里决定离子动能的关键还是在于团簇刚开始膨胀时团簇内部积聚的库仑势能的大小, 确切地说是团簇内部正电荷总量的多少.

### 3.3. 内场点火电离

我们以小尺寸团簇  $(\text{CH}_4)_{147}$  与光强为  $2 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$  的较弱激光脉冲的作用为例, 研究了团簇内部库仑场在 TI 和 BSI 电离机理中对碳离子平均价态随时间演化过程的影响, 如图5所示. 被考察离子所感受到的团簇内场是由离子(除却被考察离子)和非束缚电子共同产生的. 若不考虑团簇内部库仑电场, 仅依靠外激光场来压低势垒或者发生隧道电离, 这相当于单个碳原子发生电离, 最终都只能达到 +2 价. 这是因为电离单个碳原子到 +3 价需要的光强为  $2.3 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$ , 而这里的光强较小, 只有  $2 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$ . 但是加入对团簇内场的考虑后, 采用 TI 和 BSI 模型碳离子最终的平均价态可以分别达到 +3.5 价和 +3.9 价, 说明团簇内场的作用还是相当大的. 图6给出了在 BSI 机理下该团簇膨胀终态的离子能量分布. 通过比较实线与虚线所表示的考虑与不考虑团簇内场的结果显示, 不考虑团簇内场时, 不仅获得的离子动能偏小, 而且离子的能量分布也有较大区别. 这是因为不考虑团簇内场作用时, 由于碳离子价态只能被电离到 +2 价, 以至于团

簇中积累的库仑势能较少, 从而离子动能也主要分布在低能量范围. 此外, 从图3中也可以看出内场对团簇中离子电离的影响. 以碳原子电离到 +6 价为例, 加入团簇内场的考虑之后, 电离所需的光强从  $6.5 \times 10^{18} \text{ W/cm}^2$  减小到  $4.0 \times 10^{17} \text{ W/cm}^2$ , 减小了一个多量级. 而在实际作用过程中, 内场的作用肯定也是客观存在的. 内场的作用主要是点火机理<sup>[19]</sup>, 增强内电离. 因此在模拟计算中, 需要加入对团簇内部库仑电场的考虑.

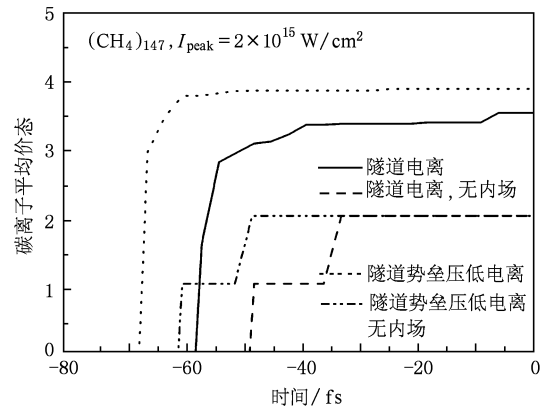


图5 团簇  $(\text{CH}_4)_{147}$  碳离子平均价态的时间演化过程. 激光脉冲的峰值光强为  $2 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$ , 对应时间零点. 脉宽为 65 fs, 中心波长为 800 nm. 实线和点线分别代表粒子动力学模拟计算中将 TI 和 BSI 作为团簇内电离的主要机理、并将团簇内库仑场考虑在内的情况, 虚线和点虚线分别代表两种机理下不考虑团簇内库仑场的情况

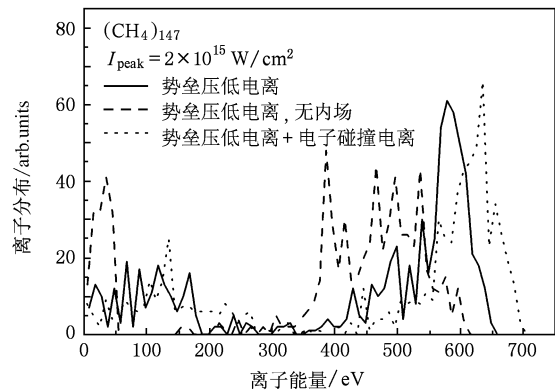


图6 团簇  $(\text{CH}_4)_{147}$  膨胀终态的离子能量分布. 激光脉冲参数与图5给出的相同. 实线、虚线、点线分别表示内电离机理包含势垒压低电离和团簇内场, 只有势垒压低电离而无团簇内场、势垒压低电离和电子碰撞电离的情况. 低能量离子分布对应碳离子(碳离子能量缩小为实际值的1/12), 高能量离子分布对应质子

需要指出的是, 两种电离机理下, 碳离子的最

终平均价态略有差别. 这是因为这里的光强较小, 团簇内场和外激光场的复合场正好处于碳离子从 +3 到 +4 价所需的电场强度之间, 两种电离机理的不同导致复合场能够将 +3 价碳离子电离到 +4 价的数目不同; 而在前一节的讨论中也提到, 采用 BSI 机理要比 TI 机理电离原子到达相同价态所需的电场强度小, 因此 BSI 机理下碳离子电离价态比 TI 机理略高.

### 3.4. 电子碰撞电离

当团簇中滞留了一定数目的自由电子时, 这些电子在激光场驱动下会碰撞其它原子使其电离, 或者与离子发生非弹性碰撞将离子再次电离, 显然这种电子碰撞电离 (electron impact ionization, EII) 机理也会影响原子的电离价态<sup>[11]</sup>.

我们讨论了在峰值光强为  $2 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$  的激光脉冲激发团簇  $(\text{CH}_4)_{147}$  膨胀的过程中, 电子碰撞电离对离子价态的影响, 结果如图 7 所示. 加入电子碰撞电离的作用后, 碳离子的平均电离价态更高, TI 和 BSI 电离机理下几乎都达到了 +4 价, 达到电离终态所需时间更短. 对于 TI 机理, 不考虑碰撞电离时, 碳离子最终的平均价态约为 +3.5, 这说明只有一半数目的碳离子可以达到 +4 价, 另外一半的碳离子只能达到 +3 价. 而碰撞电离可以将剩余一半数目的碳离子从 +3 价电离到 +4 价, 从而使碳离子的平均价态从 +3.5 价提高到 +4 价. 以碳离子平均价态作为比较指标来看, 碰撞电离的作用是很显著的. 这是因为碳离子电离到较低的平均价态 +3 价与电离到高一级的 +4 价所需的光强条件分别为  $2.3 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$  和  $4.3 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$ , 相差不是很多, 说明从 +3 价可以比较容易地电离到 +4 价, 通过碰撞电离可以实现这样的再次电离. 但是对于 BSI 机理, 大部分碳离子就已经电离到 +4 价, 加入碰撞电离只能是使小部分 +3 价的碳离子电离到 +4 价, 从而碳离子的平均价态略有增加. 但是要从 +4 价电离到 +5 价比较困难, 所需的条件很高——光强达  $3.8 \times 10^{18} \text{ W/cm}^2$ , 仅靠碰撞电离难以实现. 所以在 BSI 机理下, 碰撞电离对碳离子平均价态的影响不明显. 但是从图 6 点线和实线所表示的考虑与不考虑碰撞电离的情况下计算得到的离子能量分布中, 我们仍能看出差别: 加入碰撞电离的贡献以后, 离子的能量会有一定程度的提高, 以质子的最大动能为例, 大约提高了 50 eV.

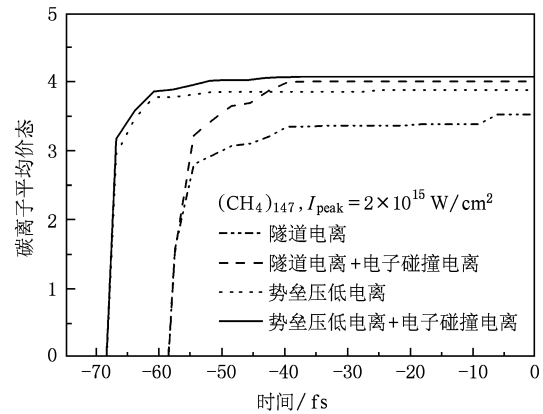


图 7 团簇  $(\text{CH}_4)_{147}$  碳离子平均价态的时间演化过程. 激光脉冲的峰值光强为  $2 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$ , 对应时间零点. 脉宽为 65 fs, 中心波长为 800 nm. 点虚线和点线分别代表粒子动力学模拟计算中将 TI 和 BSI 作为团簇内电离的主要机理, 并且未考虑 EII 的情况, 虚线和实线分别代表两种机理下考虑 EII 的情况

Ditmire<sup>[27]</sup> 采用粒子动力学的方法研究了小尺寸 (小于等于 55 原子) Ar 团簇在高强度飞秒激光脉冲作用下的碰撞过程, 讨论了电子碰撞电离对离子平均价态和平均离子能量的影响. 他的计算结果显示, 仅靠光场电离不足以产生高价态的离子, 即使对于极小尺寸的团簇 (只包含 6 个原子) 电子碰撞电离也是必需的. 而 Last 和 Jortner 的计算<sup>[28]</sup> 发现, 碰撞电离对电离产生的电子总量的贡献是很小的, 对  $\text{Xe}_{1061}$  只有 1.2% 的贡献, 而对于  $\text{Xe}_{55}$  几乎没有碰撞电离发生, 主要是激光场与团簇内库仑场的复合场使团簇发生内电离. Ishikawa 和 Blenski 对离子平均价态的考察<sup>[29]</sup> 也得到与 Last 一致的结论.

以离子平均价态作为电子碰撞电离影响大小的衡量指标, 受到团簇和激光场条件的限制, 因此才会产生以上两种差别较大的结论. 具体说来, 如果离子向更高价态电离所需的电场条件很高, 如上一段讨论的碳离子从 +4 价再电离到 +5 价比较困难, 由于电子碰撞电离的作用本身不够大, 就无法从离子价态这个指标上显示其作用; 但是如果往高价态电离所需的条件不是很高, 如碳离子从 +3 价可以比较容易地再电离到 +4 价, 电子碰撞电离就有可能使离子平均价态发生较大变化.

## 4. 结 论

我们采用三维粒子动力学模拟方法研究了强激光脉冲激励甲烷团簇发生爆炸的动力学过程, 讨

论了几种典型的内电离机理(即隧道电离、势垒压低电离、内场点火电离和电子碰撞电离)对激光与团簇相互作用过程中离子价态和终态动能的影响. 研究表明,随着激光场强度增加,团簇发生内电离的机理由以隧道电离为主转为以势垒压低电离为主. 在相同的较强激光场中,团簇更容易通过势垒

压低电离达到高的电离价态,但并不一定意味着可以获得更高的终态离子动能. 团簇发生电离后,点火电离效应和电子碰撞电离效应也将增强团簇的再次电离,从而提高团簇爆炸后离子的终态动能.

感谢上海超级计算中心对数值计算的技术支持.

- 
- [1] Ditmire T, Smith R A, Tisch J W G, Hutchinson M H R 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 3121
- [2] Taguchi T, Antonsen T M, Milchberg H M 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 205003
- [3] Ditmire T, Donnelly T, Falcone R W, Perry M D 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3122
- [4] Deiss C, Rohringer N, Burgdörfer J, Lamour E, Prigent C, Rozet J P, Vernhet D 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 013203
- [5] Ditmire T, Zweiback J, Yanovsky V P, Cowan T E, Hays G, Wharton K B 1999 *Nature* **398** 489
- [6] Zweiback J, Cowan T E, Hartley J H, Howell R, Wharton K B, Crane J K, Yanovsky V P, Hays G, Smith R A, Ditmire T 2002 *Phys. Plasmas* **9** 3108
- [7] Madison K W, Patel P K, Price D, Edens A, Allen M, Cowan T E, Zweiback J 2004 *Phys. Plasmas* **11** 270
- [8] Last I, Jortner J 2002 *J. Phys. Chem. A* **106** 10877
- [9] Lu H Y, Wang C, Chen G L, Kim C J, Liu J S, Ni G Q, Li R X, Xu Z Z 2009 *Chin. Phys. B* **18** 537
- [10] Jortner J, Last I 2002 *Chem. Phys. Chem.* **3** 845
- [11] Last I, Jortner J 2004 *J. Chem. Phys.* **120** 1336
- [12] An W K, Qiu X J, Zhu Z Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2250 (in Chinese) [安伟科、邱锡钧、朱志远 2004 *物理学报* **53** 2250]
- [13] Taguchi T, Antonsen T M, Milchberg H M 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 205003
- [14] Sakabe S, Shimizu S, Hashida M, Sato F, Tsuyukushi T, Nishihara K, Okihara S, Kagawa T, Izawa Y, Imasaki K, Iida T 2004 *Phys. Rev. A* **69** 023203
- [15] Peano F, Fonseca R A, Silva L O 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 033401
- [16] Du H C, Zhu P J, Sun S H, Liu Z Y, Li L, Ma L L, Hu B T 2009 *Chin. Phys. B* **18** 2426
- [17] Ditmire T, Donnelly T, Rubenchik A M, Falcone R W, Perry M D 1996 *Phys. Rev. A* **53** 3379
- [18] Parra E, Alexeev I, Fan J, Kim K Y, McNaught S J, Milchberg H M 2003 *J. Opt. Soc. Am. B* **20** 118
- [19] Rose-Petrucci C, Schafer K J, Wilson K R, Barty C P J 1997 *Phys. Rev. A* **55** 1182
- [20] Eberly J H, Su Q, Javanainen J 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 881
- [21] Farges J, de Feraudy M F, Raoult B, Torchet G 1986 *J. Chem. Phys.* **84** 3491
- [22] Hohenberger M, Symes D R, Madison K W, Sumeruk A, Dyer G, Edens A, Grigsby W, Hays G, Teichmann M, Ditmire T 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 195003
- [23] Li H Y, Liu J S, Wang C, Ni G Q, Li R X, Xu Z Z 2008 *Chin. Phys. B* **17** 1237
- [24] Ammosov M V, Delone N B, Krainov V P 1986 *Sov. Phys. JETP* **64** 1191
- [25] Augst S, Meyerhofer D D, Strickland D, Chint S L 1991 *J. Opt. Soc. Am. B* **8** 858
- [26] Last I, Jortner J 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 173401
- [27] Ditmire T 1998 *Phys. Rev. A* **57** R4094
- [28] Last I, Jortner J 2000 *Phys. Rev. A* **62** 013201
- [29] Ishikawa K, Blenski T 2000 *Phys. Rev. A* **62** 063204

# Inner ionization mechanisms of methane clusters driven by an ultrashort intense laser pulse<sup>\*</sup>

Li Hong-Yu<sup>1)†</sup> Liu Jian-Sheng<sup>2)</sup>

1) (*College of Physics and Electronic Information, Tianjin Normal University, Tianjin 300387, China*)

2) (*State Key Laboratory of High Field Laser Physics, Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China*)

(Received 20 September 2009; revised manuscript received 28 March 2010)

## Abstract

By use of three-dimensional particle dynamics simulations, the explosion dynamics of methane clusters driven by an ultrashort intense laser pulse has been analyzed. Especially the influences of some classical inner ionization mechanisms on the charged state and kinetic energy of the ions produced in the laser-cluster interaction process have been discussed in detail. It is presented that when the laser intensity is low, the atoms are ionized by the laser field mainly through the tunnel ionization while the barrier suppression ionization dominates for the inner ionization as the laser intensity increases. Under the irradiation of the same laser pulse with high intensity, the cluster can attain highly-ionized charged states by the barrier suppression ionization rather than by the tunnel ionization. After the cluster is ionized, the ignition ionization effect from the inner Coulomb field of the cluster and the electron impact ionization effect from the free electrons resided inside the cluster will facilitate the process that the cluster can be ionized further.

**Keywords:** ultrashort intense laser pulse, methane cluster, inner ionization

**PACC:** 3640J, 5250J

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundations of China (Grant Nos. 10674145, 11005080); the Science and Technology Development Fund Planning Project of Tianjin Colleges and Universities (Grant No. 20090908), the Doctor Foundation of Tianjin Normal University (Grant No. 52LX27).

<sup>†</sup> E-mail: hongyuli79@gmail.com