

H_2^+ 在强激光场中的解离及其量子调控的理论研究*

姚洪斌[†] 张季 彭敏 李文亮

(新疆工程学院, 新能源材料研究实验室, 乌鲁木齐 830091)

(2014年4月1日收到; 2014年5月26日收到修改稿)

利用非波恩-奥本海默近似的三维含时量子波包法, 理论研究了氢分子离子在强激光场中的解离动力学. 通过分析 H_2^+ 在不同的初始振动态 ($\nu = 0-9$) 和激光场强度下的解离核动能谱, 得到了 H_2^+ 的光解离机理及其随激光场的变化规律. 研究表明: 当激光场的强度 $I_1 = 5.0 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ 时, 分子的解离来源于高振动态 $\nu=5-9$, 其解离机理主要是通过键软化、键硬化和阈下解离过程. 当激光场的强度 $I_2 = 1.0 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 时, H_2^+ 在低振动态 $\nu = 3-4$ 上的阈上解离起主导作用, 而高振动态的键软化、键硬化和阈下解离所占的比重明显地下降了. 研究结果为后续的量子调控的实验研究提供了科学的理论预测和指导.

关键词: 光解离, 氢分子离子, 含时波包法, 核动能谱

PACS: 82.50.Nd, 33.20.Xx, 42.50.Hz

DOI: 10.7498/aps.63.198202

1 引言

随着激光技术的飞速发展, 利用激光场研究原子、分子的非线性光学现象^[1-3], 并对其实施量子调控^[4-6]是当前强场动力学领域的热点研究课题之一, 其在物理化学、量子光学、光化学、量子信息等诸多领域有着巨大应用前景和现实意义^[7]. 在众多的研究对象中, 氢分子离子及其同位素一直以来是研究分子强场动力学的典范, 这不仅是因为它具有便于理论和实验研究的简单构型——两个原子核外加一个电子, 更重要的是它在强激光场条件下会展现出许多重要的动力学现象, 例如, 键软化^[8]、键硬化^[9]、阈上解离^[10]、阈下解离^[11], 等等. 键软化是指分子键在强激光场条件下被软化而发生的快速解离. 键硬化是相对于键软化而言的, 是指分子束缚在强激光场作用下的绝热势井中, 以至于解离后具有较低的能量. 阈上解离是指分子在解离过程中吸收的光子数目大于其解离所需要的最小光子数, 使其解离后具有较高的能量. 阈下解离是指分

子在解离过程中吸收的光子数目小于其解离所需要的最小光子数, 其违背了经典力学的规律.

实验上对这些动力学现象的研究主要是通过分析分子解离后的核动能谱图. 研究表明, 解离核动能的分布与激光场的强度、波长和脉冲宽度有关^[12-16]. 为了揭示这些动力学现象所蕴含的物理机理, 理论上开展了大量的研究工作. 譬如, Hua等^[17]研究了 H_2^+ 和 D_2^+ 的多光子解离过程, 并阐明了零光子、单光子和双光子吸收的机理. Chatterjee等^[18]系统地研究了 HD^+ 的非对称性解离概率随激光场强度和脉冲宽度的变化关系. 随后, Yang等^[19]探讨了 HD^+ 的核波包在两束激光脉冲场作用下的干涉现象, 并通过调节两束脉冲场的延迟时间和相位差控制波包的干涉. Bhattacharya等^[20]阐述了 HD^+ 的各个振动态对光解离产物的贡献.

在上述的理论研究中, 采用的是目前最为广泛的研究方法——数值求解波恩-奥本海默近似下的一维含时薛定谔方程. 然而, 当激光场的强度大于

* 新疆维吾尔自治区自然科学基金(批准号: 2013211B32)资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: hbyao@mail.sdu.edu.cn

10^{12} W/cm²时, 氢分子离子的库仑势将受到外场的强烈干扰, 采用分离原子核与电子运动的研究方法很难得到精确的计算结果. 为此, Han 等人^[21,22]发展了精确求解原子核与电子耦合的三维含时量子波包法, 并利用该方法成功地研究了氢分子离子的电荷共振增强电离和多光子电离过程. 本文将在此研究基础之上, 进一步探讨氢分子离子在不同初始振动态($\nu=0-9$)上的光解离动力学, 及其随激光场强度的变化规律. 通过对各个振动态的贡献进行 Franck-Condon(FC) 加权平均, 得到了实验上可观测的解离核动能谱图, 这将为后续的实验研究提供科学的理论预测和指导.

2 理论方法

H_2^+ 在强激光场作用下满足的含时薛定谔方程(采用原子单位制)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = [H_0 + W(t)] \psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t), \quad (1)$$

其中, H_0 是 H_2^+ 在无外场时的哈密顿量, $W(t)$ 是 H_2^+ 与激光场的相互作用项. \mathbf{R} 是核间距矢量, \mathbf{r} 是电子相对于原子核质心的位置矢量. 对于 H_2^+ 分子, 同时考虑原子核与电子的运动, 需要精确求解六维的含时薛定谔方程. 对于目前的计算条件, 这是非常耗时的, 是一个无法完成的工作, 我们有必要采用一些合理的方法简化维度. 譬如, 当飞秒激光脉冲场的偏振方向定向于分子轴时, 原子核在激光场的偏振方向上作一维振动. 分子的转动在飞秒量级内可以忽略, 这主要是因为分子的转动时间尺度在皮秒量级. 同时, 电子的运动相对于分子轴具有柱对称性, 在柱坐标系下可以简化为二维运动. 因此, H_2^+ 分子的运动可以用三维的空间坐标描述: (R, ρ, z) . 其中, R 是分子的核间距, (ρ, z) 是电子在柱坐标系下的坐标位置.

H_2^+ 在无外场时的三维哈密顿量可以表示成

$$H_0 = T_R + T_z + T_\rho + V_c(R, \rho, z), \quad (2)$$

$$T_R = -\frac{1}{m_p} \frac{\partial^2}{\partial R^2}, \quad (3)$$

$$T_z = -\frac{2m_p + m_e}{4m_p m_e} \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (4)$$

$$T_\rho = -\frac{2m_p + m_e}{4m_p m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right), \quad (5)$$

$$V_c(R, \rho, z) = \frac{1}{R} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z - R/2)^2}}$$

$$-\frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z + R/2)^2}}, \quad (6)$$

其中, m_p 和 m_e 是原子核与电子的质量.

采用偶极近似, H_2^+ 与激光场的作用可以表示成(长度规范下):

$$W(t) = -E(t) \left(1 + \frac{m_e}{2m_p + m_e} \right) z, \quad (7)$$

其中, $E(t) = E_0 f(t) \cos(\omega t)$. E_0 是激光场的峰值场强, ω 是激光场的角频率, $f(t)$ 是激光场的脉冲包络, 本文采用高斯型的脉冲形式

$$f(t) = \exp \left[-\left(\frac{t}{\tau} \right)^2 \right], \quad (8)$$

其中, τ 是激光场的脉冲宽度.

为了求解上述含时薛定谔方程, 我们在 ρ 方向上使用 Crank-Nicholson(CN) 方法, 在 R 和 z 方向上使用以 sine-DVR 为基的二阶分裂算符方法^[23,24]. 为了提高计算效率, 我们根据原子核与电子运动的时间尺度差, 优化了时间传播算符, 其表示形式为

$$e^{-iH\delta t} \approx e^{-iT_R\delta t/2} \{U_e^{\text{SPO}}(\delta t/N)\}^N e^{-iT_R\delta t/2}, \quad (9)$$

其中,

$$U_e^{\text{SPO}}(\delta t) = e^{-iT_z\delta t/2} e^{-iV\delta t} e^{-iT_z\delta t/2}, \quad (10)$$

代表的是电子的时间传播算符. T_R 和 T_z 是 R 和 z 方向上的动能传播算符, V 是系统的势能, N 是原子核与电子的时间步长的比值.

本文利用虚时传播的方法获取 H_2^+ 的初始波函数, 并结合流算符和虚拟探测的方法^[25] 计算 H_2^+ 的解离概率及其核动能谱. 在具体的计算过程中, 需要使用“binning”流程来归属解离核动能对应的概率. 在数值计算中, R 方向的空间范围是: 0—25 a.u., z 方向的空间范围是: -40—40 a.u., ρ 方向的空间范围是 0—15 a.u., R , z 和 ρ 方向上的格点数目分别是 250, 400 和 30, 时间步长分别是 1 a.u., 0.05 a.u. 和 0.05 a.u.. 为了避免波函数到达边界后产生反弹, 我们分别在 R , z 和 ρ 方向上引入了吸收势.

3 结果及讨论

图 1 给出了 H_2^+ 的解离概率随初始振动态 $\nu=0-9$ 的变化规律. 图 1 (a) 和 (b) 对应的激光场强度分别为 $I_1 = 5.0 \times 10^{13}$ W/cm², $I_2 = 1.0 \times 10^{14}$ W/cm². 根据图 1 所示, 我们可以得出 H_2^+ 的解离

概率不仅与分子的初始振动态有关, 而且还与激光场强度密切相关. 譬如, 当强度 $I_1 = 5.0 \times 10^{13}$ W/cm² 时, 如图 1(a) 所示, H₂⁺ 的解离主要发生在高振动态 $\nu=5-9$ 上, 而在振动态 $\nu=3-4$ 上的解离概率很小. 当激光场的强度增大到 $I_2 = 1.0 \times 10^{14}$ W/cm² 时, 如图 1(b) 所示, H₂⁺ 在高振动态 $\nu=5-9$ 上的解离概率减小了, 尤其是 $\nu=5$ 上的解离概率下降明显. 与之相反, H₂⁺ 在振动态 $\nu=3-4$ 上的解离概率却明显地增大了. 此外, 随激光场强度的增强, 最大解离概率对应的振动态从 $\nu=9$ 转移到 $\nu=3$ 上.

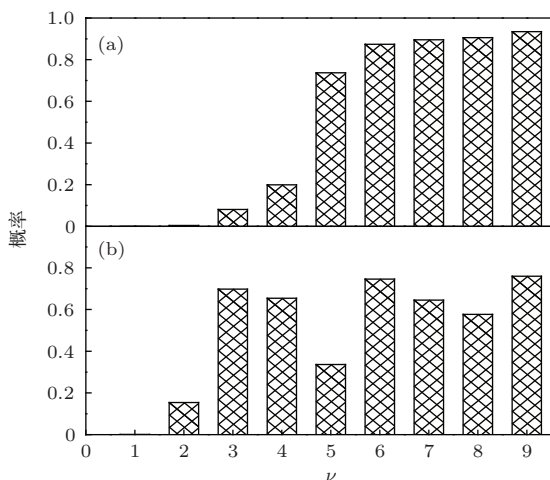


图 1 H₂⁺ 在初始振动态 $\nu=0-9$ 上的解离概率 (激光场的波长 $\lambda = 790$ nm, 脉冲宽度 $\tau = 40$ fs) (a) 激光场强度 $I_1 = 5.0 \times 10^{13}$ W/cm²; (b) 激光场强度 $I_2 = 1.0 \times 10^{14}$ W/cm²

为了揭示 H₂⁺ 的光解离机理及其随激光场强度的变化规律, 我们计算了 H₂⁺ 在初始振动态 $\nu=3-9$ 上的解离核动能谱, 如图 2 所示. 振动态 $\nu=0-2$ 上的解离概率很小, 我们就不做讨论了. 简单起见, 我们把 H₂⁺ 的解离核动能谱分为两个区域: 低能区 (0—0.6 eV)、高能区 (0.6—1.8 eV). 高能区的质子主要来源于阈上解离, 其解离过程可以用光子缀饰态模型描述^[11]. 如图 3 所示, 分子在交叉区域 3.1 a.u. 附近吸收了三个光子, 当运动到 4.7 a.u. 附近时又放出一个光子, 此阈上解离过程实际上是净双光子吸收过程. 但是, 低能区的质子的来源就比较复杂了, 它不仅可以通过键软化和键硬化解离, 而且还可以通过阈下解离过程解离. 接下来, 我们将详细地讨论各个振动态的解离机理及其随激光场强度的变化规律.

从图 2 左边的一列可以看出, 当激光场强度 $I_1 = 5.0 \times 10^{13}$ W/cm² 时, 解离峰仅仅出现在高

振动态 $\nu=5-9$ 上, 而且解离核动能都处在低能区 (0—0.6 eV). 在这些振动态的解离峰中, $\nu=9$ 具有最大的解离核动能, 其解离峰位于 0.45 eV 附近. 振动态 $\nu=9$ 对应的解离机理是键软化解离. 如图 3 所示, $\nu=9$ 的振动能级最接近于 $|1s\sigma - 0\omega\rangle$ 和 $|2p\sigma - 1\omega\rangle$ 势能曲线的交差点, 其在激光场的作用下易于直接吸收一个光子后发生键软化解离.

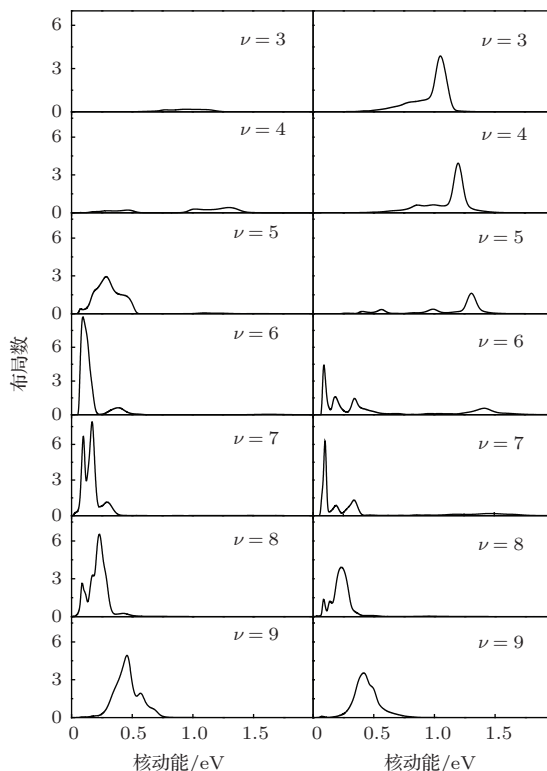


图 2 H₂⁺ 在初始振动态 $\nu=3-9$ 上的解离核动能谱 (左边一列对应的激光场强度 $I_1 = 5.0 \times 10^{13}$ W/cm²; 右边一列对应的激光场强度 $I_2 = 1.0 \times 10^{14}$ W/cm². 激光场的波长 $\lambda = 790$ nm, 脉冲宽度 $\tau = 40$ fs)

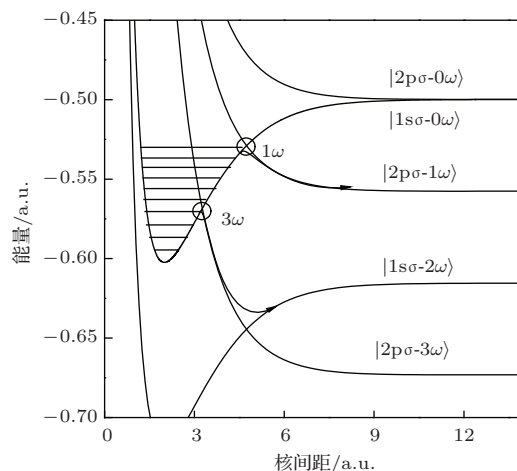


图 3 H₂⁺ 的 1s 态和 2p 态的光子缀饰态势能曲线图

振动态 $\nu=6-8$ 不仅可以通过键软化解离, 而且还可以通过键硬化解离. 在振动态 $\nu=6-8$ 的解离核动能谱中, 左边的峰对应的是键硬化解离, 右边的峰对应的是键软化解离. 键硬化解离的过程比较复杂, 无法直观的用图 3 中的光子缀饰态模型说明, 其具体的解离过程需要采用随激光场强度变化的绝热势能面描述, 文献 [9] 给出了详细的说明. 从振动态 $\nu=6-9$ 的解离核动能谱中看出, 键软化解离峰随振动量子数的增大向高能区方向移动, 而键硬化解离峰并没有随振动量子数的改变而发生移动, 其解离峰始终位于 0.1 eV 附近. 因此, 我们可以得出键软化解离核动能的大小与振动量子数有关, 键硬化解离核动能的大小与振动量子数无关.

在振动态 $\nu = 5$ 的解离核动能谱中, 只有一个明显的解离峰, 位于 0.26 eV 附近. 当激光场强度 $I_1 = 5.0 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ 时, $\nu = 5$ 的振动能级远小于单光子解离所需要的最小能量, 其很难通过键软化和键硬化过程解离. 因此, 振动态 $\nu = 5$ 的解离机理只能是阈下解离过程. 此处, 我们强调一点, 阈下解离核动能的大小与激光场的脉冲宽度有关 [11]. 当脉冲宽度变短时, 阈下解离核动能将向高能区方向移动; 当脉冲宽度变长时, 阈下解离核动能将向低能区方向移动. 当振动量子数小于 $\nu = 4$ 时, 解离概率可以忽略不计, 这主要是因为其振动能级远小于单光子解离所需要的最小能量. H_2^+ 要想在低振动态上发生解离, 其只能通过净双光子吸收引发的阈上解离过程解离. 但是, 当激光场的强度 $I_1 = 5.0 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ 时, 分子不足以吸收三个光子.

从图 2 右边的一列可以看出, 当激光场的强度增大到 $I_2 = 1.0 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 时, 解离核动能谱发生了明显的变化, 主要表现在以下三个方面: 1) 振动态 $\nu=3-6$ 的解离核动能谱在高能区 (0.6—1.8 eV) 出现了解离峰, 这些解离峰对应的是阈上解离过程. 在振动态 $\nu=3-6$ 的核动能谱中, 最高的解离峰出现在振动态 $\nu = 3$ 上, 位于 1.1 eV 附近. 这主要是因为 $\nu = 3$ 的振动能级最接近于 $|1s\sigma - 0\omega\rangle$ 和 $|2p\sigma - 3\omega\rangle$ 势能曲线的交叉点, 如图 3 所示. 在高强度激光场 $I_2 = 1.0 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 的作用下, 振动态 $\nu = 3$ 上的 H_2^+ 易于通过净双光子吸收后发生阈上解离. 2) 振动态 $\nu = 5$ 的解离核动能谱中, 阈下解离峰消失了, 这主要是因为本应发生阈下解离的分子在强激光场的作用下, 被拉回到初始束缚态上. 因此, 我们可以得出, 阈下解离过程不仅与激光

场的脉冲宽度有关, 而且还与激光场的强度相关. 激光场的脉冲宽度决定了阈下解离核动能的大小, 激光场的强度决定了阈下解离概率的大小. 3) 振动态 $\nu=6-9$ 的解离核动能谱中, 解离峰的高度明显地下降了, 这主要是因为分子在键软化和键硬化过程中, 吸收了多个光子后发生了库仑爆炸电离.

综上所述, 我们详细地讨论了 H_2^+ 的各个振动态 ($\nu=0-9$) 的解离机理及其随激光场强度的变化规律. 然而, 上述的研究结果要想通过实验证实, 必须综合考虑各个振动态的贡献, 因为目前的实验技术无法获取具有单个振动态的 H_2^+ 离子源. 如果实验上采用电子碰撞技术获取 H_2^+ 离子源的方法, H_2^+ 的振动态分布近似于 Franck-Condon(FC) 分布 [26,27]. 因此, 要想为后续的实验研究提供科学的理论预测和指导, 我们必须对各个振动态 ($\nu=0-9$) 的计算结果进行 FC 加权平均, 得到总的解离核动能谱.

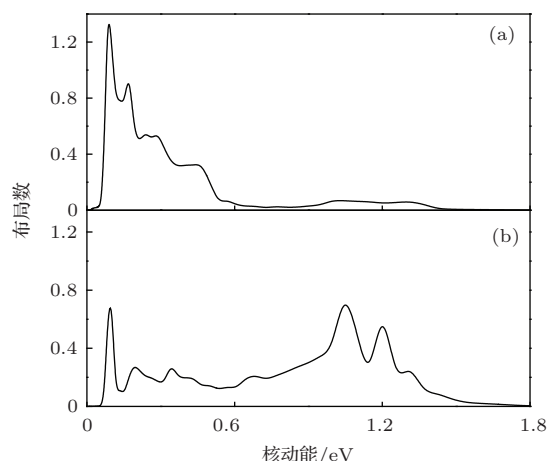


图 4 H_2^+ 的总解离核动能谱 (激光场的波长 $\lambda = 790 \text{ nm}$, 脉冲宽度 $\tau = 40 \text{ fs}$) (a) 激光场强度 $I_1 = 5.0 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$; (b) 激光场强度 $I_2 = 1.0 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$

图 4 给出 H_2^+ 对振动态 $\nu = 0-9$ 的贡献进行 FC 加权平均后的总解离核动能谱. 从图 4(a) 可以看出, 当激光场的强度 $I_1 = 5.0 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ 时, 总解离核动能主要分布于低能区 (0—0.6 eV). 其中, 最高的解离峰位于 0.1 eV 附近, 主要来源于键硬化解离, 以及部分的键软化解离. 其余的解离峰则来源于键软化和阈下解离. 当激光场的强度增大到 $I_2 = 1.0 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 时, 如图 4(b) 所示, 总解离核动能谱的高能区 (0.6—1.8 eV) 出现了明显的解离峰, 而且成为了解离主峰, 这主要是因为分子在振动态 $\nu=3-4$ 上的阈上解离随着激光场强度的增加而成为了主要的解离来源. 此外, 总解离核

动能谱中低能区(0—0.6 eV)的解离峰的高度明显地下降了,这主要是因为分子在键软化和键硬化过程中,吸收了多个光子后发生了库仑爆炸电离,以及阈下解离过程的消失.

因此,我们可以通过调节激光场的强度实现对解离通道的操控.譬如,当选取较弱的激光场强度时,高振动态的键软化和键硬化解离起主导作用;当选取较强的激光场强度时,低振动态的阈上解离将起主导作用.此外,我们还可以通过调节激光场的强度和脉宽宽度,控制分子的阈下解离能量和概率.

4 结 论

本文利用非波恩奥本海默近似的三维含时量子波包法,系统地研究了氢分子离子在不同初始振动态($\nu=0-9$)和激光场强度下的解离动力学过程及其机理.当激光场的强度 $I_1 = 5.0 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ 时, H_2^+ 释放的解离核动能分布于低能区(0—0.6 eV),其主要来源于高振动态 $\nu=5-9$ 的解离,解离过程包括了键软化、键硬化和阈下解离.键软化解离核动能随振动量子数的增大向高能区方向移动,而键硬化解离核动能的大小与振动量子数无关.阈下解离核动能的大小与激光场的脉冲宽度有关.当激光场的强度 $I_2 = 1.0 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 时, H_2^+ 释放的解离核动能主要分布于高能区(0.6—1.8 eV),其来源于振动态 $\nu=3-4$ 的阈上解离.同时,位于低能区(0—0.6 eV)的解离峰的高度明显地下降了,这主要是因为 H_2^+ 在键软化和键硬化过程中,吸收了多个光子后发生了库仑爆炸电离,以及阈下解离过程的消失.研究结果为今后量子调控的实验研究提供了科学的理论预测和指导.在后续的研究工作中,我们将利用两束激光场引发的波包干涉效应量子调控 H_2^+ 的解离动力学.

参考文献

[1] Yao H B, Zheng Y J 2012 *Chin. Phys. B* **21** 023302

- [2] Feng L Q, Chu T S, Wang L 2013 *Chin. Phys. B* **22** 023302
- [3] Yao H B, Zheng Y J 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 128201 (in Chinese) [姚洪斌, 郑雨军 2011 物理学报 **60** 128201]
- [4] Yao H B, Zheng Y J 2011 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **13** 8900
- [5] Xu T Y, He F 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 068201 (in Chinese) [徐天宇, 何峰 2013 物理学报 **62** 068201]
- [6] Yao H B, Lin S Y, Zheng Y J 2011 *J. Theor. Comp. Chem.* **10** 509
- [7] Wollenhaupt M, Engel V, Baumert T 2005 *Annu. Rev. Phys. Chem.* **56** 25
- [8] Bucksbaum P H, Zavriyev A, Muller H G, Schumacher D W 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 1883
- [9] Frasninski L J, Posthumus J H, Plumridge J, Codling K, Taday P F, Langley A J 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 3625
- [10] Jolicard G, Atabek O 1992 *Phys. Rev. A* **46** 5845
- [11] Posthumus J H 2004 *Rep. Prog. Phys.* **67** 623
- [12] Pavicic D, Kiess A, Hansch T W, Figger H 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 163002
- [13] Magrakvelidze M, He F, Niederhausen T, Litvinyuk I V, Thumm U 2009 *Phys. Rev. A* **79** 033410
- [14] Kling M F, Siedschlag C, Verhoef A J, Khan J I, Schultze M, Uphues T, Ni Y, Uiberacker M, Drescher M, Krausz F, Vrakking M J 2006 *Science* **312** 246
- [15] Esry B D, Sayler A M, Wang P Q, Carnes K D, Ben-Itzhak I 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 013003
- [16] Guo W, Lu X Q, Zhao D, Wang X L 2014 *Phys. Scr.* **89** 025401
- [17] Hua J J, Esry B D 2009 *Phys. Rev. A* **80** 013413
- [18] Chatterjee S, Dutta B, Bhattacharyya S S 2011 *Phys. Rev. A* **83** 063413
- [19] Yang D, Cong S L 2011 *Phys. Rev. A* **84** 013424
- [20] Bhattacharya R, Chatterjee S, Bhattacharyya S S 2012 *Phys. Rev. A* **85** 033424
- [21] He H X, Lu R F, Zhang P Y, Guo Y H, Han K L, He G Z 2011 *Phys. Rev. A* **84** 033418
- [22] He H X, Lu R F, Zhang P Y, Han K L, He G Z 2012 *J. Chem. Phys.* **136** 024311
- [23] Lu R F, Zhang P Y, Han K L 2008 *Phys. Rev. E* **77** 066701
- [24] Hu J, Han K L, He G Z 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 123001
- [25] Feuerstein B, Thumm U 2003 *Phys. Rev. A* **67** 043405
- [26] Ben-Itzhak I, Wang P Q, Xia J F, Sayler A M, Smith M A, Carnes K D, Esry B D 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 073002
- [27] Wang P Q, Sayler A M, Carnes K D, Xia J F, Smith M A, Esry B D, Ben-Itzhak I 2006 *Phys. Rev. A* **74** 043411

Theoretical study of the dissociation of H_2^+ and the quantum control of dynamic process by an intense laser field*

Yao Hong-Bin[†] Zhang Ji Peng Min Li Wen-Liang

(Laboratory of new energy and materials, Xinjiang Institute of Engineering, Urumqi 830091, China)

(Received 1 April 2014; revised manuscript received 26 May 2014)

Abstract

The dissociation dynamics of hydrogen molecular ions in intense fields has been investigated by using an accurate three-dimensional (3D) time-dependent wave packet approach. Its dissociation mechanism and intensity dependence can be studied by analyzing the dissociation probability and kinetic energy resolved (KER) spectra of H_2^+ . It is found that the dissociation of H_2^+ comes from $\nu=5-9$ states at the laser intensity of $I_1 = 5.0 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$. The dissociation process includes bond softening (BS), bond hardening (BH), and below threshold dissociation (BTD). As the laser intensity increases to $I_2 = 1.0 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, the above threshold dissociation (ATD) from $\nu = 3$ and 4 states is predominant, and the contributions from the bond softening and bond hardening are reduced during the dissociation process. The above conclusions may provide scientific prediction and theoretical guidance for the experiment in the future.

Keywords: photodissociation, hydrogen molecular ion, time-dependent wave packet method, kinetic energy resolved spectra

PACS: 82.50.Nd, 33.20.Xx, 42.50.Hz

DOI: [10.7498/aps.63.198202](https://doi.org/10.7498/aps.63.198202)

* Project supported by the Natural Science Foundation of Xinjiang China (Grant No. 2013211B32).

[†] Corresponding author. E-mail: hbyao@mail.sdu.edu.cn