

氢负离子在梯度电场中光剥离的波包动力学研究

陈召杭 王德华 程绍昊

Study on the photodetachment wave packet dynamics of H^- ion in a gradient electric field

Chen Zhao-Hang Wang De-Hua Cheng Shao-Hao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 233201 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.233201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.233201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I23>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[量子计算正三角形腔内的氢负离子光剥离截面](#)

[Quantum calculations for photodetachment cross sections of H in an equilateral triangle cavity](#)

物理学报.2015, 64(16): 163202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.163202>

[氢负离子在磁场和金属面附近电子通量分布的研究](#)

[Photodetached electron flux of H in magnetic field near a metal surface](#)

物理学报.2013, 62(12): 123201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.123201>

[氢负离子在变形球面附近的光剥离](#)

[Photodetachment of H near a deform sphere](#)

物理学报.2013, 62(4): 043201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.043201>

[氢负离子在磁场和电介质表面附近光剥离的研究](#)

[Photo-detachment of hydrogen negative ion in a magnetic field near a dielectric surface](#)

物理学报.2012, 61(6): 063202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.063202>

氢负离子在梯度电场中光剥离的波包动力学研究*

陈召杭 王德华[†] 程绍昊

(鲁东大学物理与光电工程学院, 烟台 264025)

(2015年7月7日收到; 2015年8月15日收到修改稿)

利用含时微扰论和闭合轨道理论相结合的方法, 给出了氢负离子在梯度电场中自关联函数的计算公式, 并且对体系的自关联函数进行了计算和分析. 重点探讨了激光脉冲的宽度、梯度电场中背景电场强度及电场梯度对氢负离子体系的自关联函数的影响. 研究结果表明, 当激光脉冲的脉冲宽度较短, 远小于剥离电子的闭合轨道的周期时, 量子波包的回归现象显著, 自关联函数中会出现一系列比较明显的回归峰, 这是由于沿闭合轨道返回的电子波包和出射的电子波包之间产生干涉形成的. 但是随着激光脉冲宽度的增加, 量子波包的回归现象减弱. 当脉冲宽度和闭合轨道的周期相差不是很大时, 自关联函数中的回归峰逐渐变宽, 振荡渐趋平缓, 相邻的峰之间发生相互干涉, 从而导致对应关系消失. 除此之外, 我们还发现梯度电场中背景电场强度和电场梯度对体系的自关联函数也会发生显著的影响. 随着背景电场强度和电场梯度的增加, 剥离电子的闭合轨道的周期变短, 自关联函数中回归峰的个数逐渐增加, 量子回归现象增强. 因此, 我们可以通过改变脉冲的宽度、外加电场强度的大小对氢负离子发生光剥离的自关联函数进行调控. 我们的结果对于实验研究原子或离子体系在外场中的波包动力学性质可以提供一定的参考价值.

关键词: 自关联函数, 光剥离, 梯度电场, 激光脉冲

PACS: 32.80.Gc, 34.35.+a, 33.80.Eh

DOI: 10.7498/aps.64.233201

1 引言

利用波包分析量子力学体系的动力学性质是原子分子物理领域一个比较热门的研究课题. 在过去的几十年中, 随着激光脉冲技术的迅速发展, 利用短脉冲激光研究波包的动力学性质成为可能^[1-3]. 由于自关联函数既是实验上可通过 pump-probe 实验测量的一个重要参量, 又可以反映量子回归现象^[4], 因此, 很多科学家借助于体系的自关联函数来研究波包的动力学性质. 1992年, Noordam 等提出利用双脉冲激光对波包动力学进行研究^[5]. Broers 等采用双脉冲激光技术测量了里德堡 Rb 原子在静电场情况下发生光电离的自动关联函数^[6]. 在 pump-probe 探测实验中, 体系的自动关联函数和观测到的电离信号密切相关, 因此, 可以通过分析电离信号对体系的动力学性质进行研

究^[7]. 在理论方面, 计算自关联函数的方法是首先将波包传播到 t 时刻, 然后再和初始时刻的波包进行重叠积分^[8,9]. 在 1995 年, Du 等利用含时微扰论和半经典闭合轨道理论相结合的方法, 首次推导出了原子或离子在外场中自关联函数的计算公式, 并且对氢负离子在电场中的自关联函数进行了计算和分析^[10,11]. 2006 年, Yu 等计算了氢原子在磁场中的自关联函数^[12]; 2009 年, Wang 等计算了氢负离子在静电场及弹性表面附近的自关联函数^[13]. 在前期的研究工作中, 主要研究的是原子或离子在均匀电场或磁场中的自关联函数, 对于非均匀电场的情况, 还未见报道. 由于梯度电场是一种典型的非均匀电场, 在 Paul 阵中的电场可以看作是由一个大的梯度场和一个小的振荡场组成. 在零级近似下, Paul 阵中的电场也可以看作一个梯度电场. 因此研究氢负离子在梯度电场中光剥离的波包动力学研究具有现实的指导意义, 对于进一步研

* 国家自然科学基金(批准号: 11374133) 和山东省高等学校科技计划项目(批准号: J13LJ04) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lduwdh@163.com

究粒子囚禁及光剥离显微实验都会提供一定的参考价值。1999年, Yang等采用闭合轨道理论首次对氢负离子在梯度电场中的光剥离进行了研究^[14]。2012年, Zhao等采用量子力学的方法对氢负离子在梯度电场中的光剥离截面进行了计算和分析^[15]。2013—2015年, 我们小组对氢负离子在梯度电场和磁场中的光剥离截面及光剥离电子通量分布进行了探讨^[16,17]。对于氢负离子在梯度电场中波包动力学的研究, 还没有研究报道。

本文利用含时微扰论和闭合轨道理论相结合的方法, 首次对氢负离子在梯度电场中的剥离电子的波包动力学进行了研究。重点探讨了激光脉冲的宽度、电场强度及电场梯度对光剥离电子的自关联函数的影响, 并且将自关联函数中出现的回归峰和剥离电子的经典闭合轨道相对应。研究结果表明, 我们可以通过改变脉冲的宽度、外加电场强度的大小对氢负离子光剥离的自关联函数进行调控, 从而更好的研究经典力学和量子力学之间的对应关系。我们的工作对于实验研究原子或离子体系在外场中的波包动力学性质可以提供一定的参考价值。文中除非另有注明外, 所使用单位都是原子单位(a.u.)。

2 理论模型和公式推导

2.1 氢负离子在梯度电场中光剥离的物理图像描述

假设氢负离子位于坐标原点, 激光的极化方向和外加的梯度电场的方向均沿 z 轴正向。梯度电场可以表示为^[18]

$$F = F_0 + \alpha z, \quad (1)$$

式中 F_0 是常数, 为背景匀强电场, α 是电场沿 z 轴方向的梯度, 其值为正并且是一个常数。氢负离子可以看成是一个电子被松散的囚禁在一个短程的球对称势 $V_b(r)$ 中。

在柱坐标系下, 体系的哈密顿量(采用原子单位)可以表示为^[14]

$$H = \frac{1}{2}(P_\rho^2 + P_z^2) + \left(F_0 + \frac{1}{2}\alpha z\right)z + V_b(r), \quad (2)$$

式中第二项表示电子与梯度电场的相互作用。 $V_b(r)$ 是一个短程势, 当氢负离子发生剥离以后, 该短程势的作用可以忽略。通过求解体系的哈密顿

运动方程, 可以得到剥离电子在 ρ 方向运动方程为

$$\rho(t) = (k \sin \theta)t, \quad (3)$$

其中 θ 是剥离电子的出射角, $k = \sqrt{2E}$ 是剥离电子的动量。

z 方向上剥离电子的运动方程为^[14]

$$z(t) = \frac{1}{\alpha} [F_0 \cos \sqrt{\alpha}t + k \sqrt{\alpha} \cos \theta \sin \sqrt{\alpha}t - F_0]. \quad (4)$$

当 $\alpha \neq 0$ 时, 在 z 方向的运动看进一步化简为^[14]

$$z(t) = \frac{1}{\alpha} \sqrt{F_0^2 + k^2 \alpha \cos^2 \theta} \sin(\sqrt{\alpha}t + \phi) - \frac{F_0}{\alpha}, \quad (5)$$

其中 $\phi = \arctan [F_0/(k\sqrt{\alpha} \cos \theta)]$ 表示振荡的相位。

根据剥离电子在 ρ 方向和 z 方向的运动方程, 可以画出剥离电子的运动轨迹。假设剥离电子的能量 $E = 0.5$ eV, 背景电场强度 $F_0 = 500$ kV/cm, 电场梯度 $\alpha = 10^{-6}$ a.u., 如图1所示。

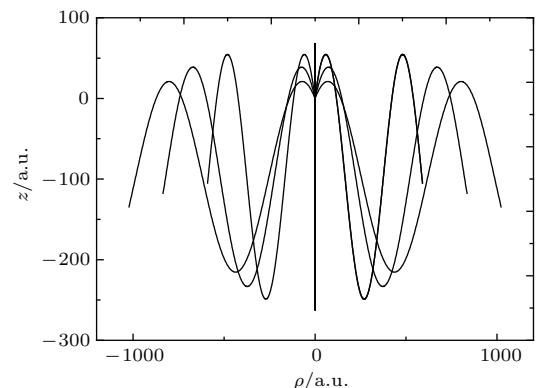


图1 梯度电场中氢负离子的光剥离电子的经典轨道。

Fig. 1. The classical trajectories of the detached electron of the negative hydrogen ion in a gradient electric field.

从图1可以看出, 只有沿 z 轴方向出射的电子才能够在梯度电场的作用下返回到原点形成闭合轨道。图中加粗的实线表示的轨道即为闭合轨道。闭合轨道可以概括为以下4条基本轨道: (i) 光剥离电子沿 $+z$ 方向出射, 到达最高点后, 在电场力的作用下返回到原点附近, 从而形成一条闭合轨道, 这种轨道称为上轨道。 (ii) 光剥离电子沿 $-z$ 方向运动, 运动到最低点后返回, 然后在电场力作用下回到原点附近, 这条闭合轨道称为下轨道。 (iii) 光剥离电子先沿着上轨道然后通过原点, 继续沿下轨道

运动最终返回到原子附近. (iv) 剥离电子先沿下轨道运动, 然后沿上轨道运动, 这种情形与(iii)的次序刚好相反. 假设这四种基本轨道所对应的周期分别为 T_1, T_2, T_3, T_4 , 经过计算, 可以得到

$$\begin{aligned} T_1 &= \frac{1}{\sqrt{\alpha}}(\pi - 2\phi), \\ T_2 &= \frac{1}{\sqrt{\alpha}}(\pi + 2\phi), \\ T_3 &= \frac{1}{\sqrt{\alpha}}(2\pi), \\ T_4 &= T_3, \end{aligned} \quad (6)$$

这里 $\phi = \arctan(F_0/k\sqrt{\alpha})$, 周期对能量的变化率

$$\begin{aligned} T'_1 &= \frac{\sqrt{2}F_0}{4\alpha E^{3/2}(1 + F_0^2/2E\alpha)}, \\ T'_2 &= -\frac{\sqrt{2}F_0}{4\alpha E^{3/2}(1 + F_0^2/2E\alpha)}, \\ T'_3 &= 0, \\ T'_4 &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

剥离电子其他的闭合轨道都可以看做是由这4条基本轨道组和而成的, 因此可以称其为组合轨道.

2.2 氢负离子在梯度电场中的自关联函数

自动关联函数表示 $t = 0$ 时刻的波函数 $\psi(0)$ 和 t 时刻的波函数 $\psi(t)$ 的重叠, 可以表示为 [10]

$$\psi^{\text{AC}}(t) = \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle. \quad (8)$$

计算中所选取高斯型激光脉冲的表达式如下:

$$f(t) = f_m \exp(-t^2/2\tau^2) \cos(\omega t + \phi), \quad (9)$$

其中, f_m 是脉冲激光的峰值, τ 是脉冲宽度, ω 是脉冲频率. 高斯型脉冲如图 2 所示.

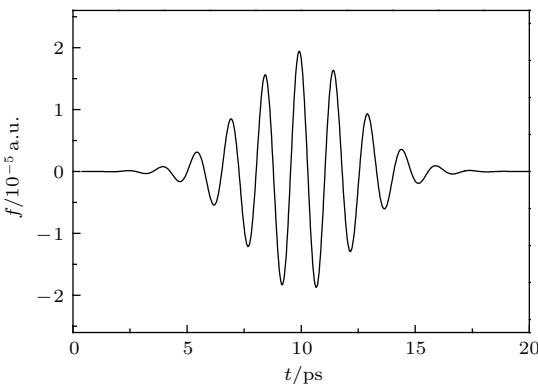


图 2 高斯型短脉冲图示

Fig. 2. The pictorial plot of a gaussian short-pulse laser.

与外加的梯度电场相比较, 激光的强度很弱, 可以看作是微扰, 因此可以利用含时微扰论进行处理. 假定氢负离子的初态波函数为 $\psi_i(r)$, 在高斯型激光脉冲的作用下产生一个波包 $\psi(t)$. 波包 $\psi(t)$ 的表达式可以用下式表示 [10]:

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \int K(t - t') f(t') D |\psi_i\rangle \\ &\times \exp(-iE_i t') dt', \end{aligned} \quad (10)$$

其中 D 是偶极算符沿激光脉冲方向的分量, E_i 是体系的初始能量, $K(t - t')$ 是剥离电子在梯度电场中的传播函数. 根据传播函数的定义, $K(t - t')$ 可以表示为 [10]

$$\begin{aligned} K(t - t') &= \int df |\psi_f\rangle \langle \psi_f| \exp(-iE_f(t - t')), \end{aligned} \quad (11)$$

其中 ψ_f 是体系的末态波函数, E_f 是体系的末态能量. 假定体系的末态波函数是归一化的, 满足: $\langle \psi_f | \psi_{f'} \rangle = \delta(f - f')$. 将 (11) 式代入 (10) 式, 得到

$$\begin{aligned} \psi(t) &= \int df |\psi_f\rangle \langle \psi_f| D |\psi_i\rangle \exp(-iE_f t) \\ &\times g(E_f - E_i), \end{aligned} \quad (12)$$

其中, $g(E_f - E_i) = \int dt f(t) \exp(i(E_f - E_i)t)$ 是激光脉冲 (10) 式的傅里叶变换. 将上式代入 (8) 式, 可以得到自关联函数的表达式为 [10]

$$\begin{aligned} \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle &= \int df |g(E_f - E_i)|^2 \langle D\psi_i | \psi_f \rangle \\ &\times \langle \psi_f | D\psi_i \rangle \exp(-iE_f t). \end{aligned} \quad (13)$$

上式还可以进一步改写为

$$\begin{aligned} &\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle \\ &= \int dE e^{-iEt} |g(E_f - E_i)|^2 \\ &\times \int df \delta(E - E(f)) \langle D\psi_i | \psi_f \rangle \\ &\times \langle \psi_f | D\psi_i \rangle. \end{aligned} \quad (14)$$

根据振子强度密度的计算公式 [15]

$$\begin{aligned} Df(E) &= 2(E - E_i) \int df \delta(E - E(f)) \langle D\psi_i | \psi_f \rangle \\ &\times \langle \psi_f | D\psi_i \rangle. \end{aligned} \quad (15)$$

自动关联函数的计算公式可以表示为

$$\begin{aligned} \psi^{\text{AC}}(t) &= \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle \\ &= \int dE \exp(-iEt) |g(E - E_i)|^2 \end{aligned}$$

$$\times \left[\frac{Df(E)}{2(E - E_i)} \right]. \quad (16)$$

在旋转波近似下, $g(E - E_i)$ 可以改写为^[10]

$$g(E - E_i) = \tau f_m \left[\frac{\pi}{2} \right]^{1/2} e^{-(E - E_i - \omega)^2 \tau^2 / 2} e^{-i\varphi}. \quad (17)$$

根据闭合轨道理论, 氢负离子在梯度电场中的振子强度密度可以近似地表示为

$$\begin{aligned} Df(E) = & \frac{8\sqrt{2}B^2}{3} \frac{E^{3/2}}{(E_b + E)^3} \\ & + \frac{4\sqrt{2}EB^2}{(E_b + E)^3} \sum_{k=1}^n h(k) \frac{1}{T_k} \\ & \times \sin(S_k + \Delta_k), \end{aligned} \quad (18)$$

其中 $B = 0.31552$ 是氢负离子初始束缚态波函数的归一化系数. T_k 是剥离电子的闭合轨道的周期, S_k 是经典作用量, 其随能量的变化率为 $dS_k/dE = T_k$. Δ_k 表示波沿着第 k 条闭合轨道传播产生的附加相位: $\Delta_k = -\mu_k \frac{\pi}{2}$, μ_k 是与轨道有关的 Maslov 指数. $h(k)$ 是一个符号因子, 其定义为^[19]

$$h(k) = \begin{cases} -1, & k = 1, 2, \\ 1, & k = 3, 4. \end{cases} \quad (19)$$

将上式对能量做泰勒级数展开, 可以得到

$$\begin{aligned} Df(E_f^c + \delta E) = & Df_0(E_f^c) + \sum_k C_k(E_f^c) \sin \left[T_k(E_f^c) \delta E \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} T'_k(E_f^c) \delta E^2 + \Delta_k(E_f^c) \right], \end{aligned} \quad (20)$$

其中 $Df_0(E_f^c)$ 是一项光滑的背景项:

$$Df_0(E_f^c) = \frac{8\sqrt{2}B^2}{3} \frac{(E_f^c)^{3/2}}{(E_b + E_f^c)^3}. \quad (21)$$

$C_k(E_f^c)$ 表示振荡的幅值:

$$C_k(E_f^c) = \frac{4\sqrt{2E_f^c}B^2}{(E_b + E_f^c)^3 T_k}. \quad (22)$$

$T'_k(E_f^c)$ 表示周期 $T_k(E_f^c)$ 随 E_f^c 的变化率, $T'_k = dT_k(E_f^c)/dE_f^c$.

将(17)和(20)代入(16)式, 积分后可得到自动关联函数^[10]

$$\psi^{\text{AC}}(t) = \left[\frac{\tau f_m^2 \sqrt{\pi^3} (Df_0)}{4\omega} \right]$$

$$\begin{aligned} & \times e^{-iE_f^c t} \left\{ e^{-t^2/4\tau^2} \right. \\ & \left. + \sum_k [G_k^-(t) + G_k^+(t)] \right\}, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} G_k^\pm = & \left[\frac{C_k}{2(Df_0)\alpha_k^\pm} \right] \\ & \times e^{-[(t \pm T_k)^2/4\tau^2(\alpha_k^\pm)^2] \mp i(\Delta_k - \pi/2)}, \end{aligned} \quad (24)$$

其中, $\alpha_k^\pm = \sqrt{1 \pm i [T'_k(E_f^c)/2\tau^2]}$. 从(23)式可以看出自动关联函数可表示为许多修正的高斯项的和的形式, 其中每一个修正的高斯项来源于振子强度密度中的振荡项.

我们可将(16)式进一步改写为

$$\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle = C_0 M(t). \quad (25)$$

由(23)式可得^[10]

$$\begin{aligned} M(t) = & e^{-t^2/4\tau^2} \\ & + \sum_k \left[\frac{d_k}{\alpha_k^-} e^{-[(t - T_k)^2/4\tau^2(\alpha_k^-)^2] + i(\Delta_k - \pi/2)} \right. \\ & \left. + \frac{d_k}{\alpha_k^+} e^{-[(t + T_k)^2/4\tau^2(\alpha_k^+)^2] - i(\Delta_k - \pi/2)} \right], \end{aligned} \quad (26)$$

其中

$$\begin{aligned} C_0 = & \frac{\tau f_m^2 \sqrt{\pi^3} (Df_0)}{4\omega} e^{-iE_f^c t}, \quad d_k = \frac{3}{2ET_k}, \\ \alpha_k^\pm = & \sqrt{1 \pm (i/2\tau^2) T'_k}. \end{aligned} \quad (27)$$

从(26)式可以看出氢负离子体系在梯度电场中的自动关联函数的峰集中在 $t = 0$ 和 $t = T_k$ 时刻. 集中在 $t = 0$ 时刻的峰, 是由(20)式振子强度密度的一项光滑的背景项, 也就是(21)式决定的. 在这个体系中还有几条稳定的闭合轨道, 这些闭合轨道与(20)式中振子强度密度中的振动项有关, 这些闭合轨道对应的自动关联函数的峰集中在 $t = T_k$ 时刻. (25)式中 C_0 恒定不变, 对所测结果没什么影响, 所以我们计算自动关联函数时只需计算 $M(t)$, $M(t)$ 是一个复函数, 在具体计算时, 我们计算 $|M(t)|$. 后面的结果主要利用(26)式得出, 分别通过变化(26)式中脉冲宽度 τ 和周期 T_k , 来研究它们对体系自关联函数的影响.

3 结果与讨论

下面, 我们对氢负离子在梯度电场中的自关联函数进行计算和分析. 从(6), (7)式可以看出, 当激

光脉冲的宽度、电场强度及电场梯度变化时, 剥离电子的闭合轨道的周期会发生改变, 体系的自关联函数也会发生相应的变化. 我们重点探讨不同的激光脉冲宽度、不同的电场强度及电场梯度对自关联函数的影响. 在计算中, 剥离电子的能量 $E = 0.5$ eV. 我们选取了剥离电子的8条闭合轨道来对自关联函数做研究, 其中第1—4条闭合轨道是4条基本的闭合轨道, 第5条轨道可以看做是第1条轨道和第4条轨道组合而成, 其周期 $T_5 = T_1 + T_4$; 第6条轨道可以看做是第2条轨道和第4条轨道

组合而成, 其周期 $T_6 = T_2 + T_4$; 第7条轨道可以看做是第3条轨道和第4条轨道组合而成, 其周期 $T_7 = T_3 + T_4$; 第8条轨道可以看做是第4条轨道重复二次而成, 其周期 $T_8 = 2T_4$. 这8条闭合轨道可以用图3简单描述.

首先, 我们来讨论不同的激光脉冲宽度对自关联函数的影响. 假定电场强度 $F_0 = 500$ kV/cm, 电场梯度 $\alpha = 10^{-6}$ a.u. 图4给出了氢负离子在梯度电场中的自关联函数随着时间脉冲宽度变化关系的三维图.

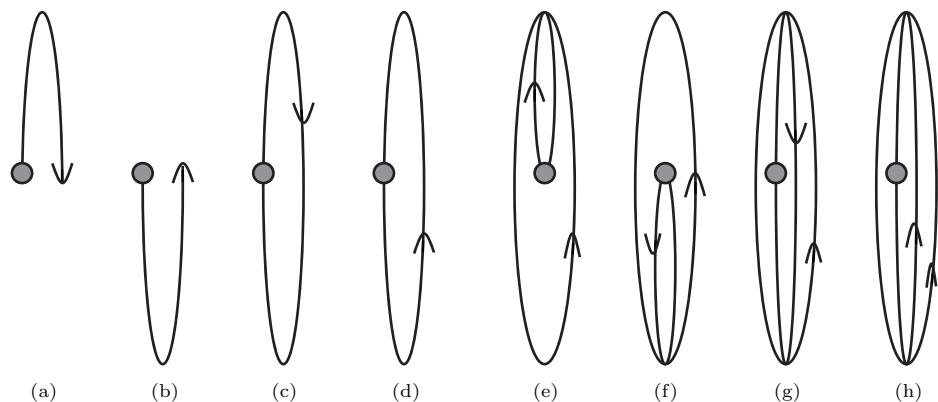


图3 8条典型的闭合轨道的示意图(注意: 实际的闭合轨道是沿 z 轴直线传播的, 而不是图中的弧线)

Fig. 3. Schematic plot of 8 typical closed orbits (note: the actual closed orbit is spread along the z axis, rather than the curve in the figure).

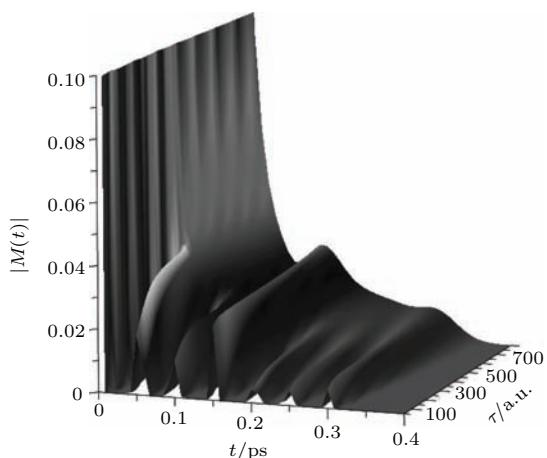


图4 激光脉冲宽度对氢负离子在梯度电场中的自关联函数的影响的三维图(其中电场强度 $F_0 = 500$ kV/cm, 电场梯度 $\alpha = 10^{-6}$ a.u., 剥离电子的能量 $E = 0.5$ eV)

Fig. 4. The three-dimensional plot for the influence of the laser pulse width on the autocorrelation function of H ion in a gradient electric field. The electric field strength $F_0 = 500$ kV/cm, the electric field gradient $\alpha = 10^{-6}$ a.u., the detached electron's energy $E = 0.5$ eV.

从图4中我们看出, 随着脉冲宽度的变化, 自关联函数的振荡结构会发生显著的变化. 在脉冲宽

度较小的时候我们可以看到6个明显的回归峰, 但随着脉冲宽度的增加, 回归峰越来越宽, 相邻的峰逐渐合并, 振荡渐趋平缓. 为了更清楚地看出激光脉冲宽度对自关联函数的影响, 我们画出了对应不同脉冲宽度的自关联函数的二维曲线. 如图5所示.

从图5可以看出, 在 $t = 0$ 时刻, 对应不同的脉冲宽度情况下的自关联函数中都有一个比较高的峰值. 这是因为在 $t = 0$ 时刻, 初始时刻波包处于原子的初始束缚态附近, 还没有在外场中传播, 因此此刻的自关联函数值最大. 这一时刻的峰值不与剥离电子的实际闭合轨道相对应. 随着时间的增大, 波包开始在梯度电场中传播, 由于电场力的作用, 有部分波包会沿着剥离电子的闭合轨道返回到原子核附近, 和 $t = 0$ 时刻的波函数发生重叠, 从而在自关联函数中出现一系列回归峰. 在图5(a)中, 脉冲宽度 $\tau = 100$ a.u. $= 0.0024$ ps. 与剥离电子的闭合轨道的周期 T_k 相比, $\tau \ll T_k$, 此时自关联函数中出现了6个回归峰, 与剥离电子的8条闭合轨道相对应. 例如, 电子波沿着第1条闭合轨道回到原子附近所对应的周期为 $T_1 = 0.053$ ps, 那么在 $t = T_1$

时刻, 返回来的电子波与出射的电子波发生干涉在图中便产生了第一个峰值. 剥离电子第2条闭合轨道的周期 $T_2 = 0.098$ ps, 因此在 $t = T_2 = 0.098$ ps 时刻, 电子波沿着第2条闭合轨道回到原子附近的电子波和初始出射的电子波发生干涉, 从而出现了第二个峰值. 在 $t = T_3 = 0.151$ ps 时刻, 自关联函数中的回归峰与剥离电子的第3条闭合轨道相对应. 由于第4条闭合轨道的周期和第3条闭合轨道的周期相同, $T_4 = T_3$, 因此沿着第4条闭合轨道回到原子附近的电子波和初始出射的电子波之间的

干涉引起的回归峰也出现在 $t = T_3 = 0.151$ ps 时刻. 另外的三个回归峰与剥离电子的组合闭合轨道一一对应. 在图5(b)中, 脉冲宽度 $\tau = 200$ a.u. = 0.0048 ps. 此时, 剥离电子的闭合轨道的周期仍大于脉冲的宽度, 因此自关联函数中仍然出现了一系列的回归峰, 但是峰值展宽. 随着脉冲宽度的进一步增加, 回归峰的宽度也逐步增加, 自关联函数中振荡的振幅变得比较平滑. 当脉冲宽度增大到 $\tau = 800$ a.u. 时(图5(e)), 相邻峰之间发生了互相干涉, 使自关联函数中相邻的两个峰合并到一起,

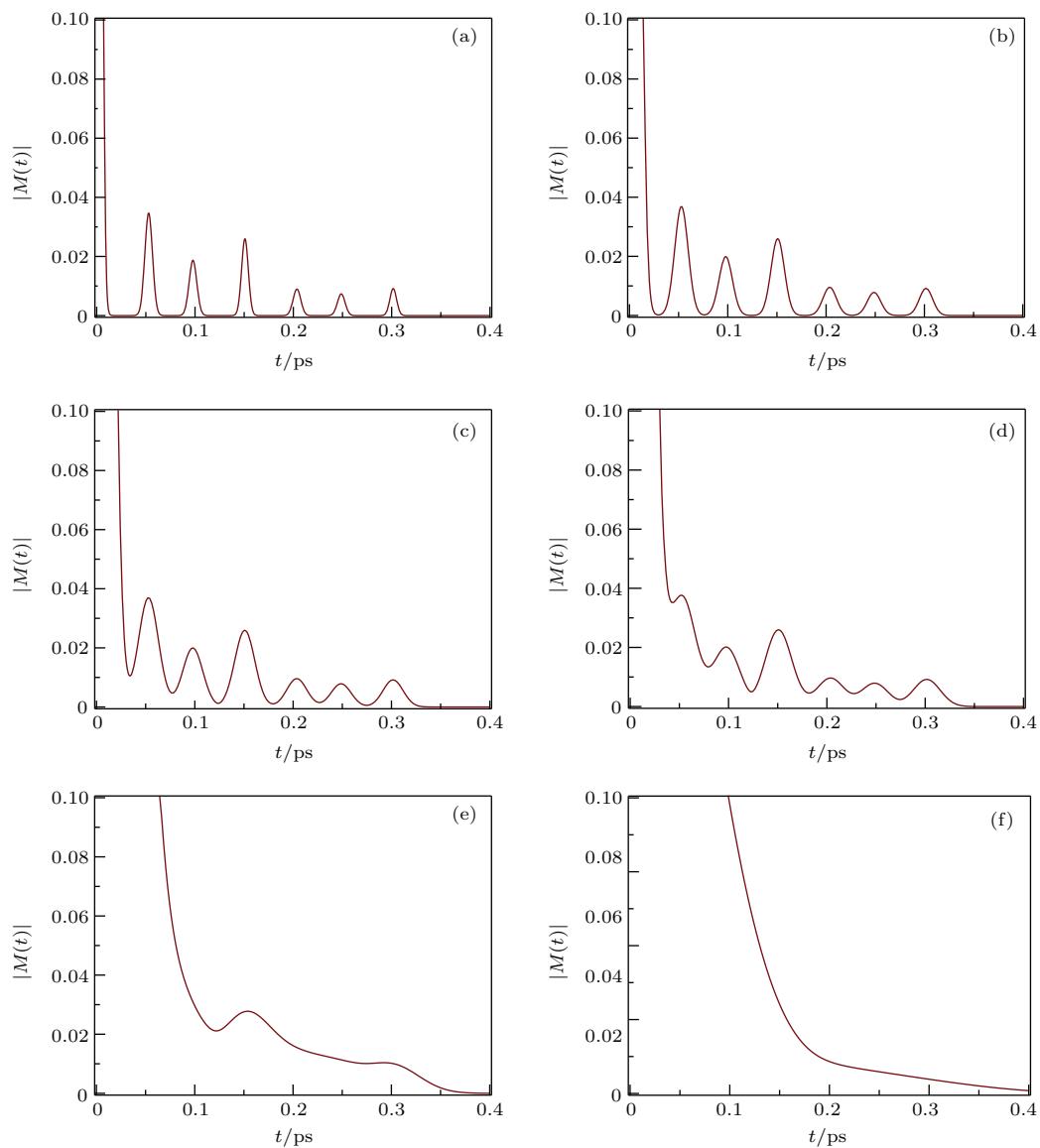


图5 激光脉冲宽度对氢负离子在梯度电场中的自关联函数的影响(其中电场强度 $F_0 = 500$ kV/cm, 电场梯度 $\alpha = 10^{-6}$ a.u., 剥离电子的能量 $E = 0.5$ eV) 激光脉冲的宽度分别为: (a) $\tau = 100$ a.u.; (b) $\tau = 200$ a.u.; (c) $\tau = 300$ a.u.; (d) $\tau = 400$ a.u.; (e) $\tau = 800$ a.u.; (f) $\tau = 2000$ a.u.

Fig. 5. The influence of the laser pulse width on the autocorrelation function of H ion in a gradient electric field. The electric field strength $F_0 = 500$ kV/cm, the electric field gradient $\alpha = 10^{-6}$ a.u., the detached electron's energy $E = 0.5$ eV. The width of the laser pulse is as follows: (a) $\tau = 100$ a.u.; (b) $\tau = 200$ a.u.; (c) $\tau = 300$ a.u.; (d) $\tau = 400$ a.u.; (e) $\tau = 800$ a.u.; (f) $\tau = 2000$ a.u..

仅仅出现了两个平滑而又很宽的峰, 自关联函数中的振荡渐趋平缓. 当脉冲宽度 $\tau = 2000$ a.u. = 0.048 ps 时(图 5(f)), 前四个基本轨道的周期分别为 $T_1 = 0.053$ ps, $T_2 = 0.098$ ps, $T_3 = T_4 = 0.151$ ps, 此时剥离电子的闭合轨道的周期虽然仍大于脉冲的宽度, 但是相邻闭合轨道的周期之差为 0.045 ps 和 0.053 ps, 非常接近于脉冲宽度, 因此自关联函数中的振荡基本消失, 变成了一条光滑的曲线. 表明当脉冲宽度非常大的时候, 量子回归现象减弱, 脉冲激光对体系的自关联函数的调制作用基本消失. 这意味着我们可以通过改变激光脉冲的宽度对体系的波包动力学性质进行调控. 比较图 5(a)–(f) 可以看出, 对于较短的激光脉冲, 自关联函数中有明显的回归峰, 并且回归峰与电子的闭合轨道的周期有明显的对应关系; 但是随着激光脉冲宽度的加大, 回归峰逐渐变宽, 由于相邻峰间的干涉效应, 这种对应关系最终消失.

下面, 我们固定激光脉冲宽度 $\tau = 100$ a.u., 电场强度梯度 $\alpha = 10^{-6}$ a.u., 讨论不同的背景电场强度的大小对自动关联函数的影响. 图 6 给出了氢负离子在梯度电场中的自关联函数随着时间背景电场强度变化关系的三维图.

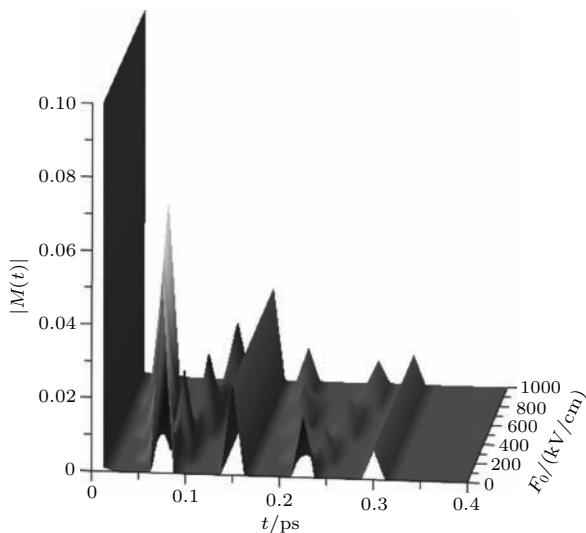


图 6 电场强度 F_0 对氢负离子在梯度电场中的自关联函数的影响的三维图(其中激光脉冲宽度 $\tau = 100$ a.u., 电场强度梯度 $\alpha = 10^{-6}$ a.u., 剥离电子的能量 $E = 0.5$ eV)

Fig. 6. The three-dimensional plot for the influence of the electric field F_0 on the autocorrelation function of H ion in a gradient electric field. The laser pulse width $\tau = 100$ a.u., the electric field gradient $\alpha = 10^{-6}$ a.u., the detached electron's energy $E = 0.5$ eV.

从图 6 可以看出, 在电场强度很小的时候, 自关联函数中出现了一系列回归峰, 并且随着电场

强度的增加, 回归峰的个数逐渐增加, 量子回归现象增强. 图 7 给出了自关联函数随着背景电场强度 F_0 变化关系的二维图.

在图 7(a) 中, 背景电场强度 $F_0 = 0.0$ kV/cm. 此时, 自关联函数中只有 4 个回归峰. 原因如下: 当背景电场强度 $F_0 = 0.0$ kV/cm 时, 只有梯度电场对剥离电子有作用. 因此, 剥离的电子的第一条闭合轨道和第二条闭合轨道的周期相同, 在我们所研究的 8 条剥离电子的闭合轨道中, 只有 4 条轨道的周期是独立的, 因此自关联函数中出现了 4 个回归峰值. 在图 7(b) 中, 背景电场强度 $F_0 = 100.0$ kV/cm. 此时, 第一条闭合轨道和第二条闭合轨道的周期不再相同, 因此自关联函数中的第一个回归峰逐渐分裂成两个回归峰, 分别和第一条和第二条闭合轨道的周期相对应; 同样, 自关联函数中的第 3 个回归峰也分裂成两个, 分别和第 5 条和第 6 条闭合轨道的周期相对应. 图 7(c) 给出的是当背景电场强度 $F_0 = 200.0$ kV/cm 时的自关联函数, 可以看出第 1 峰和第 2 个回归峰已经完全分裂成两个回归峰. 当电场强度增加到 $F_0 = 400$ kV/cm, 自关联函数中出现了 6 个比较清晰的回归峰, 分别和我们研究的 8 条闭合轨道的周期一一对应. 另外, 从图 6 和图 7 可以看出, 在 $t = 0.151$ ps 和 $t = 0.302$ ps 处, 自关联函数中始终出现回归峰, 并没有随着背景电场强度的大小发生变化, 原因如下: 在 $t = 0.150$ ps 处, 回归峰和剥离电子的第三条和第四条轨道的周期相对应, 在 $t = 0.302$ ps 处, 回归峰和剥离电子的第七条和第八条轨道的周期相对应, 从 (14) 式可以看出, 这几条闭合轨道的周期只与电场强度的梯度有关, 与背景电场强度的大小没有关系. 因此, 在 $t = 0.151$ ps 和 $t = 0.302$ ps 处, 自关联函数中回归峰的位置始终保持不变.

最后, 我们再来讨论一下当脉冲宽度 $\tau = 100$ a.u. 和背景电场强度 $F_0 = 500$ kV/cm 都不变的情况下, 不同电场梯度对氢负离子光剥离的自关联函数的影响. 图 8 画出了氢负离子在梯度电场中的自关联函数随电场梯度变化的三维图.

从图 8 可以看出, 当电场梯度很小的时候, 梯度电场对自关联函数图形产生的影响很小, 只有一个较为明显的回归峰; 随着电场梯度的增加, 电场梯度对自关联函数产生的影响越来越大, 峰值越来越多并且其值越来越高, 对应的闭合轨道的周期越来越小, 回归峰的位置逐渐向原点.

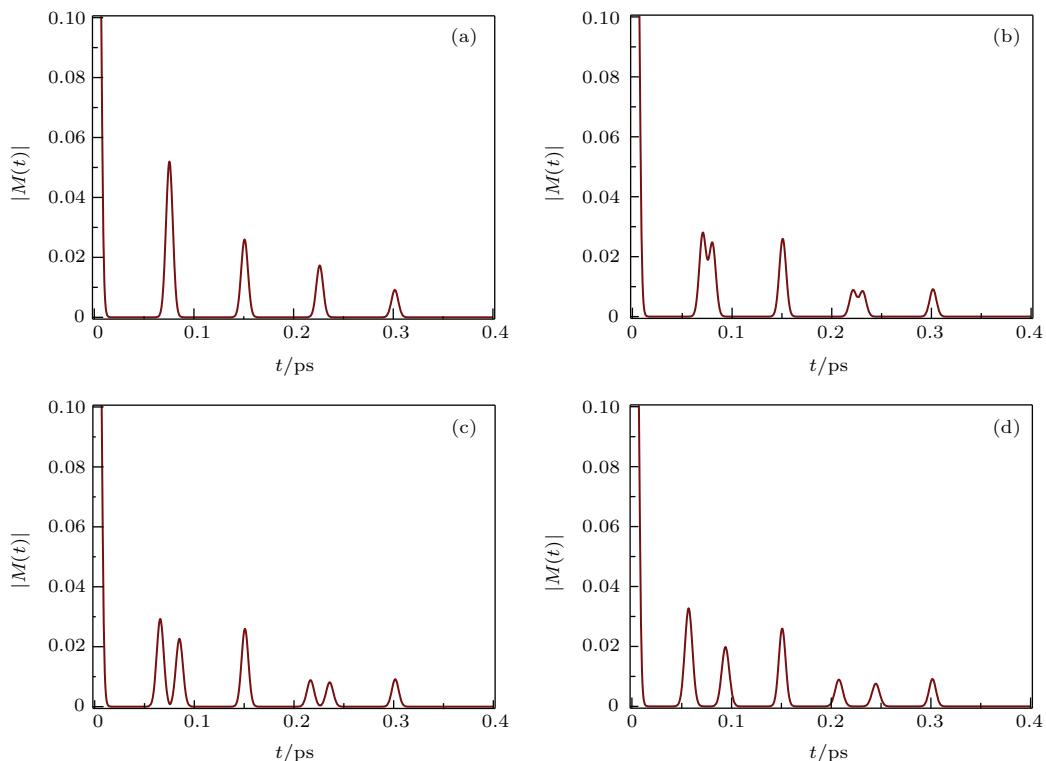


图7 电场强度 F_0 对氢负离子在梯度电场中的自关联函数的影响(其中激光脉冲宽度 $\tau = 100$ a.u., 电场强度梯度 $\alpha = 10^{-6}$ a.u., 剥离电子的能量 $E = 0.5$ eV.) 电场强度分别为: (a) $F_0 = 0.0$ kV/cm; (b) $F_0 = 100$ kV/cm; (c) $F_0 = 200$ kV/cm; (d) $F_0 = 400$ kV/cm

Fig. 7. The influence of the electric field F_0 on the autocorrelation function of H ion in a gradient electric field. The laser pulse width $\tau = 100$ a.u., the electric field gradient $\alpha = 10^{-6}$ a.u., the detached electron's energy $E = 0.5$ eV. The strength of the electric field is as follows: (a) $F_0 = 0.0$ kV/cm; (b) $F_0 = 100$ kV/cm; (c) $F_0 = 200$ kV/cm; (d) $F_0 = 400$ kV/cm.

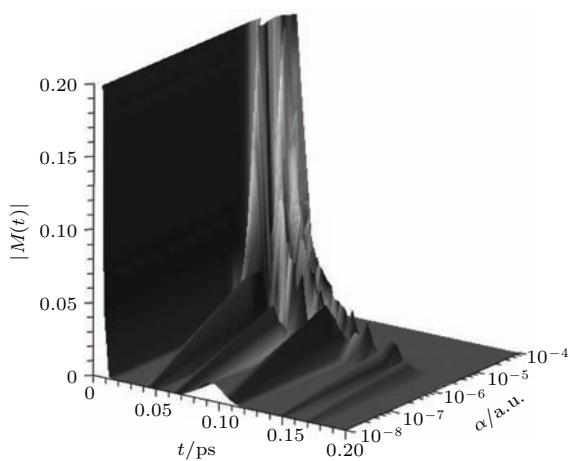


图8 氢负离子在梯度电场中电场梯度对自关联函数的影响的三维图(其中脉冲宽度 $\tau = 100$ a.u., 电场强度 $F_0 = 500$ kV/cm, 剥离电子的能量 $E = 0.5$ eV)

Fig. 8. The three-dimensional plot for the influence of the electric field gradient on the autocorrelation function of H ion in a gradient electric field. The laser pulse width $\tau = 100$ a.u., the electric field $F_0 = 500$ kV/cm, the detached electron's energy $E = 0.5$ eV.

为了更清楚的分析电场梯度对自关联函数的影响, 我们画出了对应不同电场梯度时, 自关联函

数的二维图. 如图9所示.

首先我们考虑当梯度很小的情况, $\alpha = 10^{-14}$ a.u., 计算结果如图9(a)所示. 可以看出, 此时自关联函数中只有一个回归峰, 并且此回归峰与剥离电子的第一条闭合轨道相对应. 原因如下: 当电场梯度很小时, 电场强度沿着 z 方向的变化很小, 和背景电场强度 $F_0 = 500$ kV/cm 相比, 电场梯度的影响可以忽略不计. 因此, 剥离电子的闭合轨道和在匀强电场中的情况相同, 只有一条沿着 $+z$ 轴方向出射的闭合轨道. 所以, 自关联函数中只有一个回归峰, 和氢负离子在匀强电场中光剥离的自关联函数一致^[10]. 图9(b)给出的是当 $\alpha = 10^{-7}$ a.u. 时的自关联函数. 可以看出, 和图9(a)相比, 梯度电场就对剥离电子的运动产生了影响, 此时闭合轨道的条数增加, 因此自关联函数中回归峰的个数增加. 但是, 在此种情况下, 和背景电场强度 $F_0 = 500$ kV/cm 相比, 电场梯度的值仍然较小, 除了第一条闭合轨道的周期较小之外, 其他几条闭合轨道的周期相对较大, 因此返回波和出射波的

干涉也比较弱, 因此自关联函数中回归峰的数值相对较小. 随着电场梯度的逐渐增加, 电场梯度对剥离电子的影响逐渐增强. 例如: 当电场梯度增大到 $\alpha = 10^{-6}$ a.u.(图 9(c)), 这时自关联函数中出现了6个比较明显的回归峰, 和剥离电子的8条闭合轨道相对应. 当电场梯度增大到 $\alpha = 10^{-5}$ a.u. 时, 和背景匀强电场相比, 梯度电场的影响占主要

地位, 第1条闭合轨道和第2条闭合轨道的周期相差很小, 因此自关联函数中的第一个回归峰和第二个回归峰发生重叠; 同样, 第5条闭合轨道和第6条闭合轨道的周期也相差很小, 因此这两条闭合轨道对应的回归峰也出现重叠, 因此自关联函数中有4个回归峰出现, 并且回归峰的位置逐渐向原点靠近.

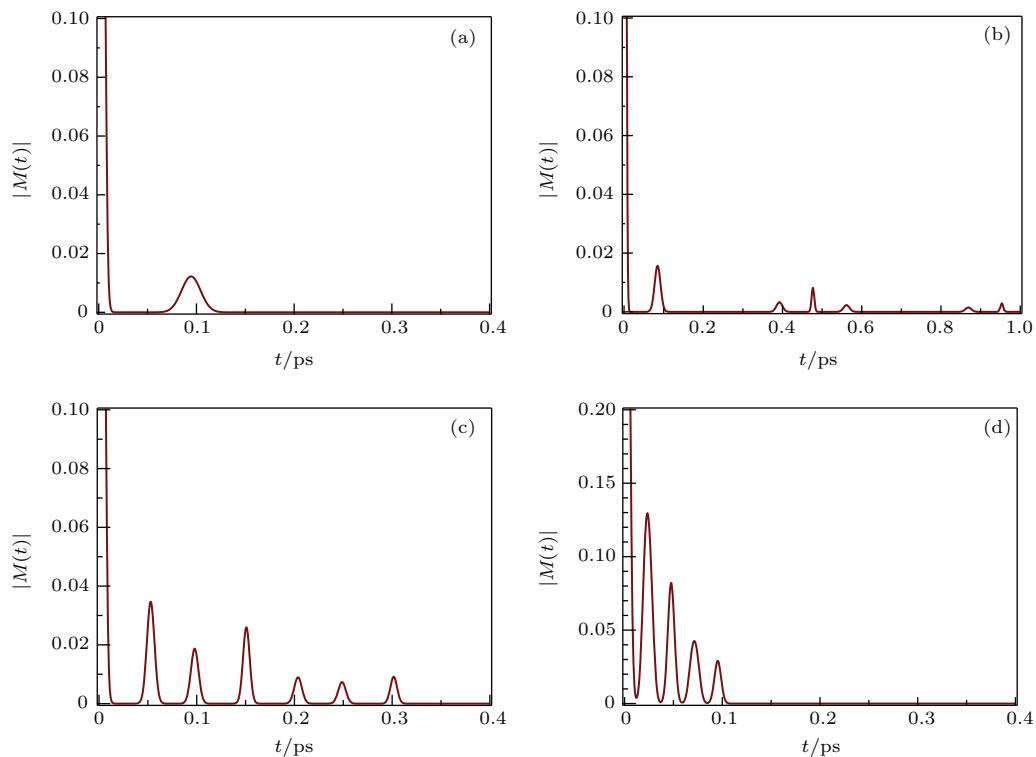


图9 不同电场梯度对氢负离子光剥离的自关联函数的影响(其中脉冲宽度 $\tau = 100$ a.u., 电场强度 $F_0 = 500$ kV/cm, 剥离电子的能量 $E = 0.5$ eV.) 电场梯度分别为: (a) $\alpha = 10^{-14}$ a.u.; (b) $\alpha = 10^{-7}$ a.u.; (c) $\alpha = 10^{-6}$ a.u.; (d) $\alpha = 10^{-5}$ a.u.

Fig. 9. The influence of different electric field gradient on the autocorrelation function of H ion in a gradient electric field. The laser pulse width $\tau = 100$ a.u., the electric field $F_0 = 500$ kV/cm, the detached electron's energy $E = 0.5$ eV. The electric field gradient is as follows: (a) $\alpha = 10^{-14}$ a.u.; (b) $\alpha = 10^{-7}$ a.u.; (c) $\alpha = 10^{-6}$ a.u.; (d) $\alpha = 10^{-5}$ a.u.

4 结 论

利用含时微扰论和闭合轨道理论相结合的方法, 推导出了氢负离子在梯度电场中自关联函数的计算公式. 计算结果表明自动关联函数中出现了一系列的回归峰, 这是由于沿闭合轨道返回的电子波包和出射的电子波包之间产生干涉形成的. 当激光脉冲的脉冲宽度远小于闭合轨道的周期时, 量子波包回归现象显著, 自关联函数中会出现一系列比较明显的回归峰, 并且每一个回归峰和剥离电子的一

条闭合轨道相对应. 当激光脉冲的脉冲宽度和闭合轨道的周期相差不是很大时, 量子波包的回归现象减弱, 自关联函数中的回归峰变宽, 相邻的峰之间发生重叠, 对应关系最终消失. 除此之外, 背景电场强度及电场梯度的大小都会对氢负离子体系的自关联函数产生显著影响. 因此, 我们可以通过改变脉冲的宽度、外加电场强度的大小对氢负离子发生光剥离的自关联函数进行调控, 从而更好的研究经典力学和量子力学之间的对应关系. 我们的工作对于实验研究原子或离子体系在外场中的波包动力学性质可以提供一定的参考价值.

参考文献

- [1] Alber G, Zoller P 1991 *Phys. Rep.* **199** 231
- [2] Beims M W, Alber G 1993 *Phys. Rev. A* **48** 3123
- [3] Parker J, Stroud Jr C R 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 716
- [4] Robinett R W 2004 *Phys. Rep.* **392** 1
- [5] Noordam L D, Duncan D I, Gallagher T F 1992 *Phys. Rev. A* **45** 4734
- [6] Broers B, Christian J F 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 344
- [7] Alber G, Ritsch H, Zoller P 1986 *Phys. Rev. A* **34** 1058
- [8] Heller E J, Chem J 1991 *Phys.* **94** 2723
- [9] Tomsovic S, Heller E J 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 1405
- [10] Du M L 1995 *Phys. Rev. A* **51** 1955
- [11] Du M L, Delos J B 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1896
- [12] Yu Y L, Zhao X, Li H Y, Guo W H, Lin S L 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 2948
- [13] Wang L F, Wang Y W, Ran S Y, Yang G C 2009 *J. Electron. Spectrosc.* **173** 40
- [14] Yang G C, Mao J M, Du M L 1999 *Phys. Rev. A* **59** 2053
- [15] Wu X Q, Du M L, Zhao H J 2012 *Chin. Phys. B* **24** 043202
- [16] Wang D H, Tan X M, Zhao G 2013 *Phys. Soc. Jpn.* **82** 064301
- [17] Wang D H, Tang T T 2015 *Commun. Theor. Phys.* **63**
- [18] Pradip K Ghosh 1995 *Ions Trap.* Clarendon Press 736
- [19] Yang G C, Du M L 2007 *Phys. Rev. A* **75** 029904

Study on the photodetachment wave packet dynamics of H^- ion in a gradient electric field*

Chen Zhao-Hang Wang De-Hua[†] Cheng Shao-Hao

(School of Physics and Optoelectronic Engineering, Ludong University, Yantai 264025, China)

(Received 7 July 2015; revised manuscript received 15 August 2015)

Abstract

Using the combination of the time-dependent perturbation theory and the closed-orbit theory, we put forward a calculation formula for the autocorrelation function of H^- ion in a gradient electric field, and then calculate and analyze the autocorrelation function of the system. Especially, we discuss the effect of laser pulse width, electric field strength and the electric field gradient on the autocorrelation function of H^- ion in a gradient electric field. It is demonstrated that when the laser pulse width is very narrow, far less than the period of the detached electron, the quantum wave packet revival phenomenon is significant. A series of sharp reviving peaks appear in the autocorrelation function, which are caused by the interference between the returning electron wave packets travelling along the closed orbit and the outgoing electron wave packets. However, with the increase of laser pulse width, the quantum wave packet revival phenomenon becomes weakened. When the difference between the pulse width and the period of the closed orbit is not very large, the reviving peaks in the autocorrelation function become widely spread gradually and the oscillatory structures get flattened. This correspondence will vanish finally due to the interference between the adjacent peaks. In addition, our study also suggests that the background electric field strength and the electric field gradient in the gradient electric field can also have significant effects on the autocorrelation function. With the increase of background electric field strength and electric field gradient, the period of the detached electron's closed orbit gets shorter, the number of the revival peaks in the autocorrelation function is increased gradually, and the quantum wave packet revival phenomenon will be enhanced. Therefore, we can control the autocorrelation function of the hydrogen negative ion by changing the laser pulse width and the external electric field strength. Our results will provide some reference values for the experimental research on the wave packet dynamic property of atoms or ions in external fields.

Keywords: autocorrelation function, photodetachment, gradient electric field, laser pulse

PACS: 32.80.Gc, 34.35.+a, 33.80.Eh

DOI: 10.7498/aps.64.233201

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11374133) and the Higher Educational Science and Technology Program of Shandong Province, China (Grant No. J13LJ04).

† Corresponding author. E-mail: lduwdh@163.com