

## 原子势对阈上电离平台的影响\*

田原野 郭福明 杨玉军†

(吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012)

(2012年8月23日收到; 2012年11月29日收到修改稿)

本文从理论上分别研究了长程和短程原子势对阈上电离光电子谱平台结构的影响. 发现在相当大的激光参数范围内, 长程势的阈上电离谱总是呈现出清晰的双平台结构; 对于短程势, 阈上电离谱双平台的界限不再清晰, 随着入射激光强度的减小, 逐渐从双平台过渡到单平台. 基于经典分析和量子力学数值模拟, 阐明了在不同模型势下, 电离速率的差别和再散射电子弹性碰撞截面的不同导致了上述平台结构的差异. 此外, 还讨论了激光脉冲空间强度分布对这一现象的影响.

**关键词:** 阈上电离, 离子势影响, 中红外激光脉冲

**PACS:** 32.80.Rm, 42.50.Hz

**DOI:** 10.7498/aps.62.073202

## 1 引言

随着超强激光脉冲技术的发展, 目前已经能够获得持续时间为几个光学周期, 强度远大于原子单位光强的高强度相干光源<sup>[1,2]</sup>. 利用这样的高强度激光脉冲与原子相互作用, 可以观察到高次谐波发射 (HHG), 阈上电离 (ATI), 非序列双电子电离等强场物理现象<sup>[3-6]</sup>. 其中 ATI 是首先被发现的非微扰现象, 对这个现象的研究已有数十年的历史<sup>[4,5,7-19]</sup>. 实验上, 人们可以利用 ATI 光电子谱来测量入射超短激光脉冲的载波包络相位<sup>[20,21]</sup>. 另外, 阈上电离也被用来探测原子、分子结构<sup>[22-25]</sup>.

近期, 人们利用超短高强度中红外激光脉冲<sup>[26,27]</sup>和原子、分子相互作用, 在 ATI 谱的低能区附近发现了新的奇异结构<sup>[28,29]</sup>. 研究发现该结构产生的原因是中红外强激光场作用下库仑长程相互作用引起的<sup>[29]</sup>. Liu 等<sup>[30]</sup>利用 3300 nm 中红外激光作用于不同势模型原子, 研究了钾原子 HHG 和 ATI. 发现在足够高的激光强度下, ATI 电子能谱存在两个平台, 并认为其中第一个平台源于激发态的电离, 第二个平台源于重散射过程. 而对于短程势, 只观察到一个平台结构.

本文通过系统地研究计算长程势和短程势模型氟原子的 ATI 能谱, 发现产生该结构的原因在于电离和重碰过程中不同势函数对电子的电离和重散射影响不同. 对于长程势原子 ATI 谱出现两个平台, 能量较低的平台源于直接电离效应, 能量较高的平台源于电离电子返回母离子发生的重散射过程. 利用经典分析和量子计算, 研究了在“三步”模型<sup>[31]</sup>中的电离过程和重散射过程对 ATI 平台结构的影响, 阐明了该现象产生的物理机理. 此外, 还讨论了激光脉冲空间强度分布对这一 ATI 能谱的影响.

若无特殊说明, 本文均采用原子单位.

## 2 理论方法

为了得到体系的 ATI 光电子发射谱, 首先需要计算体系任意时刻的含时波函数. 波函数满足的含时薛定谔方程为 (速度规范和偶极近似)

$$i \frac{\partial \psi_V(x, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) + A(t) \cdot p \right] \psi_V(x, t), \quad (1)$$

这里的  $V(x)$  是电子感受到核的吸引势,  $A(t)$  为激光

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11274141, 11034003) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: yangyj@jlu.edu.cn

场的矢势,  $p = -i\nabla$ . 本文选择高斯型激光脉冲, 激光的电场

$$E(t) = -\frac{\partial}{\partial t}A(t) = E_0 f(t) \sin(\omega t), \quad (2)$$

其中  $E_0$ ,  $\omega$  分别为激光脉冲电场的峰值振幅和激光脉冲的中心频率,  $f(t) = \exp\left[-4\ln 2 \frac{(t-t_c)^2}{\tau_p}\right]$  为激光脉冲的包络. 这里,  $t_c$  为脉冲包络中心,  $\tau_p$  为该脉冲的半高全宽, 定义  $\tau_p = 2\pi N_p/\omega$ ,  $N_p$  为激光脉冲的光学周期数目.

对于方程 (1), 采用有限差分方案, 利用 Crank-Nicholson 方法数值求解, 可以得到体系任意时刻的含时波函数 [32]. 采用 Javanainen 等人的计算方案, 首先计算体系无外场时的连续态波函数, 之后在激光脉冲结束时向原子无外场的连续态投影, 进而计算出 ATI 光电子发射谱 [33]. 为保证计算结果的收敛性, 本文中选择的范围空间为  $-3000-3000$ , 时间和空间步长分别为 0.011 和 0.046.

为了分析不同势函数对电离速率的影响, 我们计算了无场时体系的束缚态波函数, 含时波函数向无外场时体系束缚态投影, 得到任意时刻体系的束缚态概率振幅:

$$c_n(t) = \langle \phi_n(x) | \Psi(x, t) \rangle, \quad (3)$$

进而可以得到体系的电离概率为

$$p_{\text{ion}} = 1 - \sum_{n=0}^{N_{\text{max}}} |c_n(t)|^2. \quad (4)$$

为了分析 ATI 光电子谱平台结构的来源, 我们还数值求解了电离电子满足的牛顿方程 (忽略原子势对其影响)

$$\ddot{x}(t) = -E(t), \quad (5)$$

$$\dot{x}(t) = \dot{x}(t_0) + \int_{t_0}^t \dot{x}(t') dt'. \quad (6)$$

### 3 结果与分析

对于模型原子的描述选择两种势函数: 长程软化库仑势 [10]  $V_c(x) = -1/\sqrt{x^2 + a^2}$  和短程势 [12]  $V_s(x) = -\exp(-|x|)/\sqrt{x^2 + a^2}$ , 此处我们选择的长程势函数和短程势函数的  $a$  值分别为 1.055 和 0.577 以使两种势函数的模型原子基态电离能一致, 均为 0.641 (为氟原子第一电离势), 此参数下对于短程势函数只有一个束缚态. 利用峰值电场强度  $E_0 = 0.076$ , 脉冲持续时间对应的光学圈数分别为  $N_p = 2$  和  $N_p = 10$  的入射激光辐照原子得到的 ATI

谱分别如图 1(a) 和 (b) 所示. 从图中我们可以看出, 无论对于长脉冲还是短脉冲, 长程库仑势和短程势函数的 ATI 相比, 均呈现两个平台, 截止能量分别在约  $2-3U_p$  (对于  $N_p = 10$  约  $2U_p$ ; 对于  $N_p = 2$ , 由于短脉冲的包络效应使得平台稍有扩展, 约为  $3U_p$ ) 和  $10U_p$  附近. 对于短程势原子, 双平台结构不是十分清晰, 有逐渐趋近于一个平台的趋势. 这和 Liu 等 [30] 的结论一致, 差别在于我们选择的激光脉冲波长为 800 nm, 而他们的工作中激光波长为 3300 nm. 通过改变入射激光的波长, 研究 ATI 谱的结构, 发现长程和短程势原子 ATI 谱的双平台特征的异同并不依赖于波长的变化.

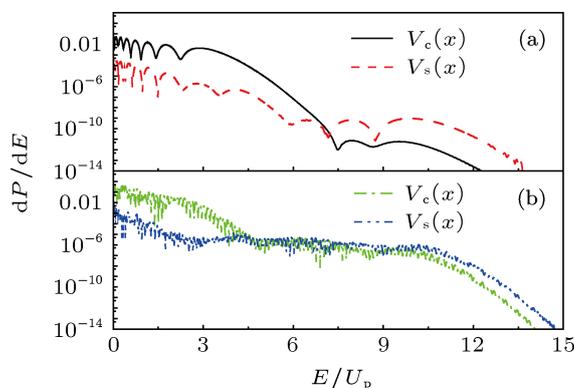


图 1 长程和短程模型原子在不同脉冲宽激光作用下的 ATI 谱 (a)  $N_p = 2$ ; (b)  $N_p = 10$

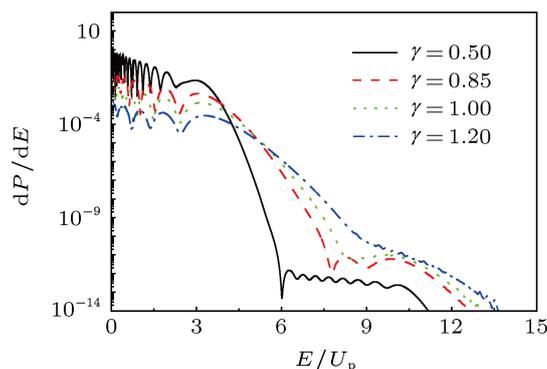


图 2 长程势模型在不同强度激光脉冲作用下的 ATI 谱

在入射激光脉宽为 2 个光学周期的条件下, 选择不同的激光强度研究上述现象和场强的依赖关系. 如图 2 所示为长程库仑势原子 ATI 谱随着激光强度的变化, 选择的激光强度从多光子区过渡到隧穿区, 对应的 Keldysh 因子  $\gamma = \sqrt{I_p}/(2U_p)^{3/4}$  [34] 分别为 1.200, 1.000, 0.850 和 0.500. 图中横轴的单位为对应各不同激光强度的有质动力能  $U_p$ . 从图中可以看出, 随着场强的逐渐增加, 原子的 ATI 谱中的

两个平台结构变得更清晰,两个平台之间的强度差别更明显. 尤其是对于  $\gamma = 0.500$  的情况,两个平台的截止位置可以清楚地标定为  $3U_p$  和  $10U_p$ .

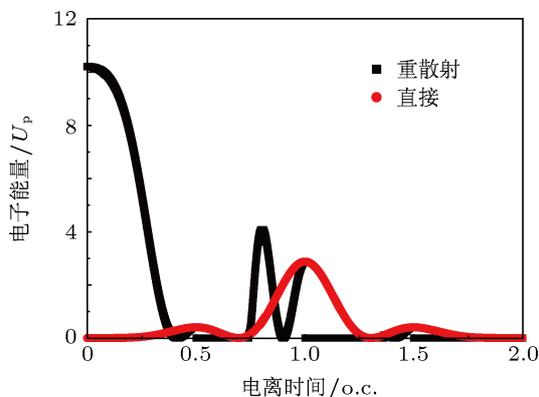


图3 入射激光脉冲  $N_p = 2$  作用下利用“三步”模型计算得到的直接和重散射电子的能量随电离时间的演化

这两个截止位置可以根据“三步”模型计算出来. 根据该模型,第一个平台来源于电子在激光场作用下直接电离的结果,第二个平台来源于电子电离后,在激光场作用下离开母离子,当激光电场改变方向后,反向加速回到母离子与其发生弹性碰撞(重散射)再离开母离子的结果. 利用该模型,我们获得了激光脉冲结束后直接电离的电子和重散射电子的能量与电离时间的对应关系,如图3所示. 从图中可以看出,最大动能的直接电离的电子电离的时刻为1个光学周期(O.C.),对应的最大电子能量为  $2.860U_p$ . 而最大动能的重散射电子的能量为  $10U_p$ ,产生自脉冲的起始阶段. 通过经典和量子模拟的结果的对比分析,可以看出图中的第一个平台来源于直接电离电子,第二个平台来源于重散射过程.

对于短程势模型原子,同样改变入射激光脉冲强度,选择的参数和图2相同. 研究发现,随着入射激光脉冲强度的增加,ATI谱结构特征的变化出现了和长程势原子一致的结果. 随着入射激光强度减小,其光电子谱逐渐趋近于一个平台,两个平台的界限逐渐模糊. 当隧穿起主导作用时,如  $\gamma = 0.500$ ,可以观察到清晰的直接从基态电离的平台和重散射平台. 值得注意的是在图中除了可以看到直接电离的截止能量在  $2.800U_p$  附近的平台外,还可以看到重散射的截止能量为  $4U_p$  的新的平台,这个平台的强度远大于能量是  $10U_p$  的散射平台,其原因是前者对应的电离时刻的即时电场强度较后者大很多.

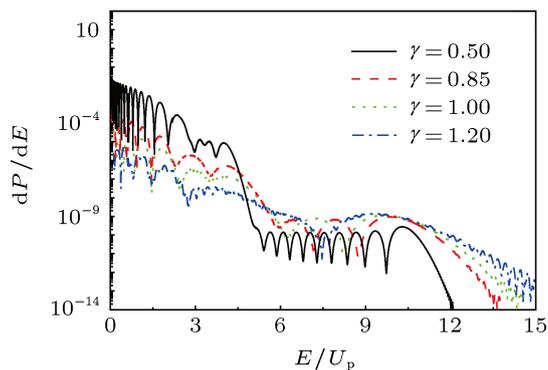


图4 短程势模型在不同强度激光脉冲作用下的ATI谱

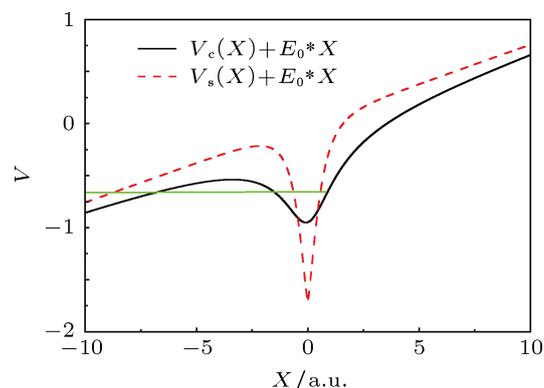


图5 长程和短程原子势在峰值电场作用下的势函数,图中绿线所指的位置为体系的基态能量

通过比较图2和图4可以看出,对于短程模型原子只出现一个ATI平台的原因并不只是原子势的短程效应,还和入射激光的强度相关. 为了讨论在相同入射激光强度下,相同电离能的长程势和短程势的ATI发射谱行为的差别,需要分析“三步”模型的每一步对其的影响. 对于第二步由于入射激光场的相同,电子从势阱中电离出来后的运动时间相同,因此产生的弥散等效应也一致,这一过程对于长程和短程原子的影响是相同的. 对于电离阶段,在相同激光脉冲作用下,长程原子和短程原子中电子感受到的由激光和原子势结合的合成势函数有很大差别,如图5所示. 两个无场的势函数具有共同的基态能量,初始时刻电子均布居在体系的基态. 当在激光电场峰值作用时,电子电离需要隧穿由原子势和激光电场共同形成的势垒. 和长程势模型相比,短程势原子中电子电离需要隧穿的势垒更高更宽,因此电子的电离概率更小.

为了验证这一结论,运用(4)式,我们计算了在强激光作用下的原子的电离随着时间的变化,如图6所示. 这里我们选择的入射激光脉宽为10个周期. 图6(a)为短程势原子的结果,  $\gamma = 0.850$ ,图6(b)

为长程软化库仑原子,  $\gamma = 0.850$  的电离概率的变化. 可以清楚地看到, 在相同激光脉冲辐照下, 短程模型原子的电离概率比长程库仑原子小一个数量级. 若增加入射激光强度到  $\gamma = 0.500$ , 产生的电离概率和软化库仑原子在  $\gamma = 0.850$  时的电离概率一致.

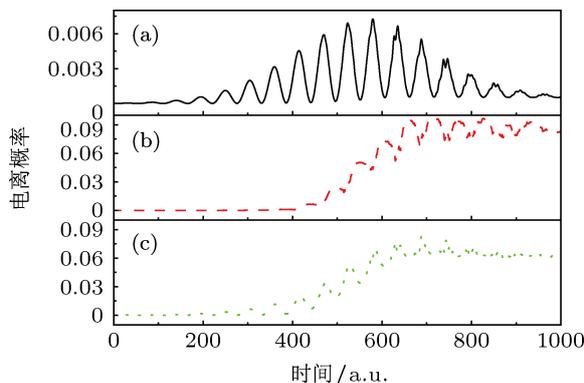


图6  $N_p = 10$  的入射激光作用下的电离概率 (a) 短程模型原子,  $\gamma = 0.850$ ; (b) 长程库仑原子,  $\gamma = 0.850$ ; (c) 短程模型原子,  $\gamma = 0.500$

在图7中, 给出了这几种电离情况下的 ATI 谱. 从图中可以看到, 在相同的入射激光强度作用下, 和长程库仑势相比, 短程势模型的两个 ATI 发射平台特征不明显. 随着入射激光强度的增加, 在和长程势电离概率接近的条件下, 其 ATI 谱的双平台结构变得更清晰. 随着入射激光强度的增加, 整体的 ATI 谱的幅值增加, 但是对于第一个平台的前端的强度增加的更为明显. 为了得到接近的 ATI 谱分布, 对于短程势模型需要选择更大的入射激光强度, 这样可以保证二者的电离概率接近.

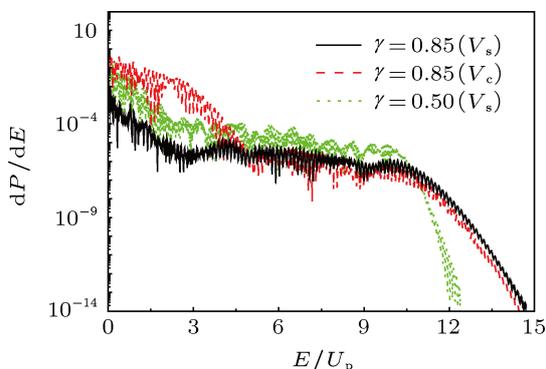


图7 和图6相同参数下的 ATI 谱: 黑色实线对应图6(a); 红色划线对应图6(b); 绿色点线对应图6(c)

重散射电子的概率除了受入射激光电场的强度影响外, 还和这部分电子返回到母离子时与母离子发生弹性散射的概率有关. 为了分析不同势函数

对运动电子弹性散射概率的影响, 我们假设不同动量的高斯波包与势阱发生弹性散射. 图8的数值模拟结果表明: 电子与短程原子势发生弹性散射的截面远大于电子与长程势的弹性散射截面. 其原因在于电子返回核区时, 由于短程势变化急剧, 对电子的作用力更大, 因此和长程势函数相比, 电子有更多机会发生弹性散射. 由此可以看出, 在电离概率相同的条件下, 短程势对应的重散射 ATI 谱的强度会远大于长程库仑原子的强度.

根据上面分析可以看出长程和短程原子势在电离和重散射过程中的差别: 在激光强度相同的条件下短程原子电离概率远小于长程库仑原子, 因此 ATI 谱中直接发射部分短程势原子的强度更小; 短程模型原子的重散射截面更大, 在相同电离条件下, 短程势原子的 ATI 谱中重散射部分的强度更大. 和长程势相比, 短程势的 ATI 谱在直接电离部分更小, 在弹性反射部分强度更大, 因此存在两个 ATI 平台变成一个 ATI 平台的趋势.

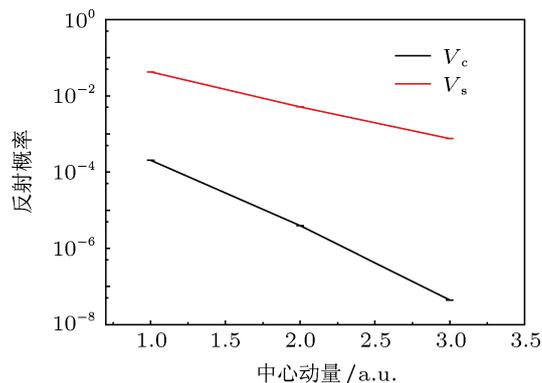


图8 不同中心动量的高斯型电子波包与原子势阱的弹性散射: 黑线表示长程势阱对电子波包的反射概率, 红线表示短程势阱对电子波包的反射概率

当然, 上述原子势函数对 ATI 谱结构特征影响的规律只是我们在单原子响应层次上的理论模拟结果, 还有待实验的验证. 为了便于将来与实验结果的比较, 我们做了如下的多原子集体效应的初步讨论. 由于入射激光脉冲在空间分布的不均匀性, 在实验上观察到的 ATI 谱来源于脉冲作用下不同空间的不同光强的共同作用. 为此, 利用 Morishita 等人给出的方案<sup>[35]</sup>, 计算了激光脉冲强度分布效应对 ATI 的影响, 如图9所示. 从图中可以看出, 在考虑了激光脉冲空间分布效应后, 得到的 ATI 分布和只考虑一个原子在峰值时刻的结果十分接近, 只是在多原子集体效应情况下能够观察到的振荡结构变得较为平坦.

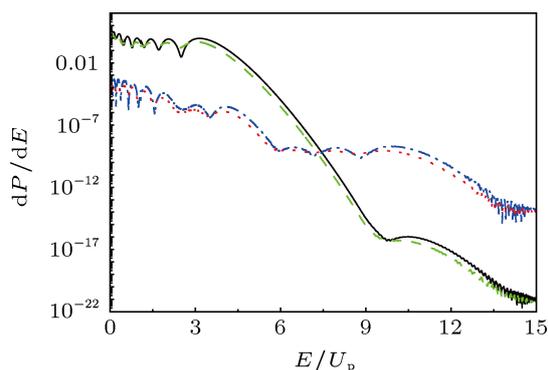


图9 入射激光强度  $\gamma = 0.850$ , 激光波长为 3300 nm 作用下长程和短程势的 ATI 谱: 黑色实线为长程库仑势单原子的结果, 绿色点线为长程库仑势考虑体积效应的结果, 红色划线为短程势单原子的结果, 蓝色点划线为短程势考虑体积效应的结果

## 4 结论

本文通过求解一维的含时薛定谔方程, 系统研究了长程库仑势和短程势在强激光作用下的 ATI 发射谱. 发现在入射激光强度相同的条件下, 对于长程库仑原子 ATI 谱中存在两个强度相差很大的平台, 对于短程原子这两个平台的发射强度相差较小. 根据对原子电离概率和电子散射截面的分析, 发现这一差别来源于在相同激光脉冲作用下短程势电离概率小于长程库仑势的结果, 在相同电离概率条件下, 短程势的电离电子与母离子发生弹性散射的概率远大于库仑势.

- [1] Protopapas M, Keitel C H, Knight P L 1997 *Rep. Prog. Phys.* **60** 389
- [2] Brabec T, Krauze F 2000 *Rev. Mod. Phys.* **72** 545
- [3] Zhou Z Y, Yuan J M 2007 *Chin. Phys.* **16** 675
- [4] Wang B B, Li X F, Gao L H, Fu P M, Guo D S, Freeman R R 2001 *Chin. Phys. Lett.* **18** 1199
- [5] Tong X M, Li J M 1991 *Acta Phys. Sin.* **40** 190 (in Chinese) [全晓明, 李家明 1991 物理学报 **40** 190]
- [6] Li Y, Yang S P, Jia X Y, Chen J 2010 *Chin. Phys. B* **19** 043303
- [7] Chen B Z 1990 *Acta Phys. Sin.* **39** 40 (in Chinese) [陈宝振 1990 物理学报 **39** 40]
- [8] Schafer K J, Yang B, DiMauro L F, Kulander K C 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 1599
- [9] Paulus G G, Nicklich W, Xu H, Lambropoulos P, Walther H 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 2851
- [10] Cormier E, Garzella D, Breger P, Agostini P, Cheriaux G, Leblanc C 2001 *J. Phys. B* **34** L9
- [11] Becker W, Grasbon F, Kopold R, Milosevic D B, Paulus G G, Walther H 2002 *Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics* **48** 35
- [12] Grasbon F, Paulus G G, Walther H, Villaresi P, Sansone G, Stagira S, Nisoli M, Silverstri S 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 173003
- [13] Bauer D 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 113001
- [14] Milosevic D B, Paulus G G, Bauer D, Becker W 2006 *J. Phys. B* **39** R203
- [15] Milosevic D B, Hasovic E, Busalazic M, Gazibegovic-busuladzic A, Becker W 2007 *Phys. Rev. A* **76** 053410
- [16] Telnov D A, Chu S I 2009 *Phys. Rev. A* **79** 043421
- [17] Marchenko T, Muller H G, Schafer K J, Vrakking M J 2010 *J. Phys. B* **43** 185001
- [18] Guo L, Han S S, Chen J 2010 *Optics Express* **18** 1240
- [19] Armstrong G S J, Parker J S, Taylor K T 2011 *New. J. Phys.* **13** 013024
- [20] Tong X M, Hino K, Toshima N 2008 *Phys. Rev. A* **74** 031405(R)
- [21] Kling M F, Rauschenberger J, Verhoef A J, Hasovic E, Uphues T, Milosevic D B, Muller H G, Vrakking M J J 2008 *New. Journal. Phys.* **10** 025024
- [22] Kamta G L, Bandrauk A D 2006 *Phys. Rev. A* **74** 033415
- [23] Meckel M, Comtois D, Zeidler D, Staudte A, Pavićić D, Bandulet H C, Pepin H, Kieffer J C, Dörner R, Villeneuve D M, Corkum P B 2008 *Science* **320** 1478
- [24] van der Zwan E V, Lein M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 043004
- [25] Blaga C I, Xu J L, Dichiara A D, Sistrunk E, Zhang K, Agostini P, Miller T A, DiMauro L F, Lin C D 2012 *Nature* **483** 194
- [26] Andriu G, Balciunas T, Alisauskas S, Pugzlys A, Baltuska A, Popmintchev T, Chen M C, Murnane M M, Kapteyn H C 2011 *Opt. Lett.* **36** 2755
- [27] Agostini P, DiMauro L F 2008 *Contemp. Phys.* **49** 179
- [28] Blaga C I, Catoire F, Colosimo P, Paulus G G, Muller H G, Agostini P, DiMauro L F 2009 *Natu. Phys.* **5** 335
- [29] Quan W, Lin Z, Wu M, Kang H, Liu H, Liu X, Chen J, Liu J, He X T, Chen S G, Xiong H, Guo L, Xu H, Fu Y, Cheng Y, Xu Z Z 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 093001
- [30] Liu C P, Nakajima T, Sakka T, Ohgaki H 2008 *Phys. Rev. A* **77** 043411
- [31] Corkum P B 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 1994
- [32] Yang Y J, Chen G, Chen J G, Zhu Q R 2004 *Chin. Phys. Lett.* **21** 652
- [33] Javanainen J, Eberly J H, Su Q 1988 *Phys. Rev. A* **38** 3430
- [34] Sprangle P, Penano J R, Hafizi B 2002 *Phys. Rev. E* **66** 046418
- [35] Morishita T, Chen Z G, Watanabe S, Lin C D 2007 *Phys. Rev. A* **75** 023407

# The effect of atomic potential on the above threshold ionization\*

Tian Yuan-Ye Guo Fu-Ming Yang Yu-Jun<sup>†</sup>

(*Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun 130012, China*)

(Received 23 August 2012; revised manuscript received 29 November 2012)

## Abstract

We investigate theoretically the influence of the long-range and short-range potentials on the plateau structure of the above threshold ionization. In a considerable range of laser parameter, the above threshold ionization spectra of the atoms in the long-range potential always exhibit a clear double-plateau structure; as for the atoms with a short-range potential, the boundary of the double-plateau in photoelectron spectra is no longer clear, and with the decrease of laser intensity, it transits from the double-plateau to the single-plateau gradually. The numerical simulation based on classical analysis and quantum mechanics illustrates that in different model potentials, the distinction of ionization rates as well as the difference of the electronic elastic rescattering cross-sections results in the difference of plateau structures. In addition, the influence of intensity distribution of laser pulse on the phenomenon is discussed.

**Keywords:** above threshold ionization, influence of ionic potential, mid-infrared laser pulses

**PACS:** 32.80.Rm, 42.50.Hz

**DOI:** 10.7498/aps.62.073202

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11274141, 11034003).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: yangyj@jlu.edu.cn