

氢团簇在飞秒强激光场中的动力学行为

张春艳 刘显明

Dynamic behavior of hydrogen clusters under intense femtosecond laser

Zhang Chun-Yan Liu Xian-Ming

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 163601 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.163601

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.163601>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I16>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

PM2.5 大气污染对自由空间量子通信性能的影响

Influences of PM2.5 atmospheric pollution on the performance of free space quantum communication

物理学报.2015, 64(15): 150301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.150301>

三维传输子量子比特的退相干参数表征

Decoherence characterization of three-dimensional transmon

物理学报.2014, 63(22): 220305 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.220305>

表面离子阱的衬底效应模型研究及新型离子阱设计

Substrate effect on surface-electrode ion trap and hybrid design for ion trap

物理学报.2014, 63(6): 060303 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.060303>

初态对光波导阵列中连续量子行走影响的研究

Effects of initial states on continuous-time quantum walk in the optical waveguide array

物理学报.2013, 62(9): 090301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.090301>

超导量子比特的耦合研究进展

Progress of coupled superconducting qubits

物理学报.2013, 62(1): 010301 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.010301>

# 氢团簇在飞秒强激光场中的动力学行为\*

张春艳<sup>†</sup> 刘显明

(湖北民族学院物理系, 恩施 445000)

(2015年4月3日收到; 2015年4月21日收到修改稿)

利用分子动力学方法研究了氢团簇在飞秒强激光场中的动力学行为. 与库仑爆炸模型所预言的不同, 团簇的膨胀是各向异性的, 质子平均动能沿激光场极化方向上的分量要明显大于垂直于激光场极化方向上的分量. 讨论了团簇各向异性膨胀产生的原因, 分析了激光和团簇参数对各向异性程度的影响.

**关键词:** 飞秒强激光场, 氢团簇, 各向异性, 分子动力学模拟

**PACS:** 36.40.-c, 52.50.Jm

**DOI:** 10.7498/aps.64.163601

## 1 引言

团簇在强激光场的辐照下表现出了不同于气体与固体的特性: 高激光能量吸收率<sup>[1-3]</sup>、产生高能高电荷态离子<sup>[4-7]</sup>、辐射强X射线<sup>[1,8-10]</sup>、产生高次谐波<sup>[11,12]</sup>以及引发核聚变等<sup>[13-15]</sup>. 因此, 强激光场与团簇的相互作用备受关注. 然而, 大多数的研究主要集中于考察高能离子<sup>[14,16]</sup>、高电荷态离子<sup>[17,18]</sup>以及强X射线<sup>[19-21]</sup>的产生机制, 对离子能量的空间分布情况关注较少. 2001年及之后的几年, Kumarappan等<sup>[22-25]</sup>在研究强激光场与团簇相互作用时发现离子能量的空间分布是各向异性的. 对各向异性的产生, 人们提出了两种不同的机理: 一种认为团簇离子能量分布的各向异性是由团簇的极化场引起的<sup>[23,26]</sup>; 另一种认为各向异性的产生是由团簇空间电场分布不均造成的<sup>[25,27]</sup>. 但以上机理仅适用于多电子原子或分子团簇. 然而, 2007年, Symes等<sup>[28]</sup>在研究强激光场下氢团簇的行为时观察到氢团簇的膨胀同样存在各向异性.

关于团簇在强激光场下的膨胀机理, 人们通常采用以下两种简化模型进行描述: 1) 纯库仑爆炸模型<sup>[3,29]</sup>, 即当激光强度足够高时, 团簇能够发生陡直电离, 团簇内部的离子由于受到库仑力的作用而

发生各向同性膨胀; 2) 流体力学模型<sup>[4,30]</sup>, 当团簇尺寸较大, 而激光强度相对较弱时, 大部分自由电子会滞留在团簇内部, 团簇可看作是准中性的等离子体微球, 在电子热效应作用下等离子体微球经历各向同性的流体力学膨胀. 然而, 在大多数情况下, 电子既不会被瞬间剥离, 又不会永久滞留于团簇内部. 在这种情况下团簇内部空间电场的分布并不是各向同性的, 无法再利用库仑爆炸模型或者流体力学模型进行解释, 需要引入更为准确的方法来研究团簇爆炸的物理过程.

文献<sup>[31, 32]</sup>采用分子动力学方法研究了氢团簇各向异性膨胀的原因. 本文在此基础上着重研究了强激光场与氢团簇相互作用过程中团簇内质子平均动能的各分量随时间变化的情况、团簇膨胀各向异性程度随时间的变化情况以及激光和团簇参数对各向异性程度的影响.

## 2 强激光场与氢团簇相互作用的分子动力学模型

在考虑强激光场与氢团簇相互作用时, 我们做了如下近似, 团簇内部原子在发生电离以前, 电子为束缚电子, 团簇内部原子呈电中性, 不受激光场

\* 国家自然科学基金(批准号: 11365008, 51408204)资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: 15210529496@163.com

的作用, 而当激光脉冲达到一定强度时, 氢团簇立即发生内电离, 此后团簇内部的质子与自由电子均被当作是经典粒子, 满足经典牛顿运动方程:

$$\frac{dp_i}{dt} = q_i e E(t) - \sum_{j \neq i} \nabla \Phi_{ij}, \quad (1)$$

其中  $p_i, q_i$  分别表示粒子的动量和价态;  $e$  表示电子电量,  $E$  表示激光电场强度,  $\Phi_{ij}$  表示粒子间相互作用势. 本文中粒子间相互作用势的形式为

$$\Phi_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} & \text{I,} \\ \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + \frac{c}{r_{ij}^6} & \text{II,} \end{cases} \quad (2)$$

其中 (2) 式中的 I 式表示电子与电子、质子与质子间的相互作用势形式, 式中  $\epsilon_0$  表示真空介电常数,  $r_{ij}$  表示发生相互作用的两粒子间的相对距离; II 式表示电子与质子间的相互作用势形式, 与 I 式不同的是, 为了避免因电子与质子无限靠近而使相互作用势趋于无穷, II 式引入了势能软化项  $\frac{c}{r_{ij}^6}$ , 在计算氢团簇时我们取  $c = 0.2$ , 因为当所有的氢原子均处于基态时,  $\Phi_0 = -13.6$  eV 正好为氢原子基态能量.

在模拟过程中, 我们采用沿  $Z$  轴方向偏振的高斯激光脉冲, 其形式为

$$E = E_0 \exp \left[ -2.773 \left( \frac{t}{T} \right)^2 \right] \sin(\omega t), \quad (3)$$

其中  $E_0, T, \omega$  分别表示激光电场的振幅、半高宽以及振荡频率. 时间  $t$  可从  $-\infty$  取到  $\infty$ , 当  $t = 0$  时, 激光强度取最大值. 但本文所取的相互作用时间间隔是从团簇发生内电离时刻开始, 到激光电场强度下降到  $0.5$  V/Å 时刻终止. 如何判断团簇是否发生内电离, 本文采用势垒压低电离 (barrier suppression ionization) 机理<sup>[33,34]</sup>, 即团簇内部粒子要发生电离则必须满足:

$$-2[eEB(k+1)^{\frac{1}{2}}] \leq U_b, \quad (4)$$

其中  $B = 14.385$  eVÅ,  $U_b$  表示电离势. 对于氢原子  $U_b = -13.6$  eV, 要使氢团簇发生内电离, 则  $E \geq 3.214$  V/Å.

### 3 飞秒强激光场中氢团簇的各向异性膨胀

当氢团簇发生内电离后, 团簇内部的电子以及质子可以当作是经典带电粒子, 从而受到激光场的作用. 在激光场的作用下, 氢团簇逐步发生外电离,

同时团簇向各个方向膨胀. 由团簇构象以及内部质子平均动量的分量随时间的变化情况, 可以比较清晰地看到氢团簇内部粒子的运动是各向异性的, 在激光偏振方向上呈现明显的优越性.

#### 3.1 团簇在激光场中的膨胀

本文采用所建立的模型模拟了飞秒强激光场下氢团簇的膨胀过程. 图 1 展示了强度  $I = 10^{17}$  W/cm<sup>2</sup>、脉宽  $T = 60$  fs 的激光与半径为  $6.64$  Å 氢团簇相互作用过程中, 从内电离发生时刻 ( $t = 0$  fs) 开始到内电离发生后  $35$  fs 时刻 ( $t = 35$  fs) 团簇在  $XOZ$  平面内构象变化情况. 图中灰色圆点表示电子, 黑色圆点表示质子. 由图 1 可以看到, 激光并没有在瞬间将电子完全剥离开, 而是经历了将近  $35$  fs 的过程, 在这个过程中, 团簇内部的电子因为受到激光场的作用而沿激光场极化方向振荡, 每次振荡将会有一部分电子逃逸出团簇之外. 电子的逃逸会引起两个关联效应: 1) 电子振荡引起的空间电场的各向异性分布无法得到中和, 电子振荡过程中会被拉向团簇的一极, 使得氢团簇的另一极拥有更强的空间电场, 该区域的质子所受的库仑斥力更大, 且在每一个激光振荡周期内团簇内部的电子数都在减少, 从而导致由电子振荡引起的质子极向加速度的平均值不为零; 2) 在每一次的振荡过程中, 将会有一部分电子逃逸出团簇之外, 在逃逸过程中电子会拉动团簇极端上的质子沿电子飞出方向运动, 从而使得该极的质子获得额外极向加速度. 这两个关联效应将会导致氢团簇的膨胀呈现各向异性. 由  $t = 15, 20, 25$  fs 时刻的构像图, 可以看到  $Z$  轴方向上两极端的质子距离团簇中心的距离要大于  $X$  轴方向两极端的质子距离团簇中心的距离.

#### 3.2 质子平均动能分布的各向异性

在考察强激光场下氢团簇中质子平均动能随时间的变化情况时, 我们将质子平均动能的各分量 ( $E_X, E_Y, E_Z$ ) 分别进行了研究. 图 2 展示了强度  $I = 1 \times 10^{17}$  W/cm<sup>2</sup>、脉宽  $T = 60$  fs、波长  $\lambda = 800$  nm 的激光与半径  $r = 6.64$  Å 的团簇相互作用时, 质子平均动能的各分量随时间变化的情况. 由图 2 可以看到, 团簇膨胀后质子平均动能的  $Z$  分量要明显大于  $X$  与  $Y$  分量. 从而说明质子平均动能分布是呈各向异性的.

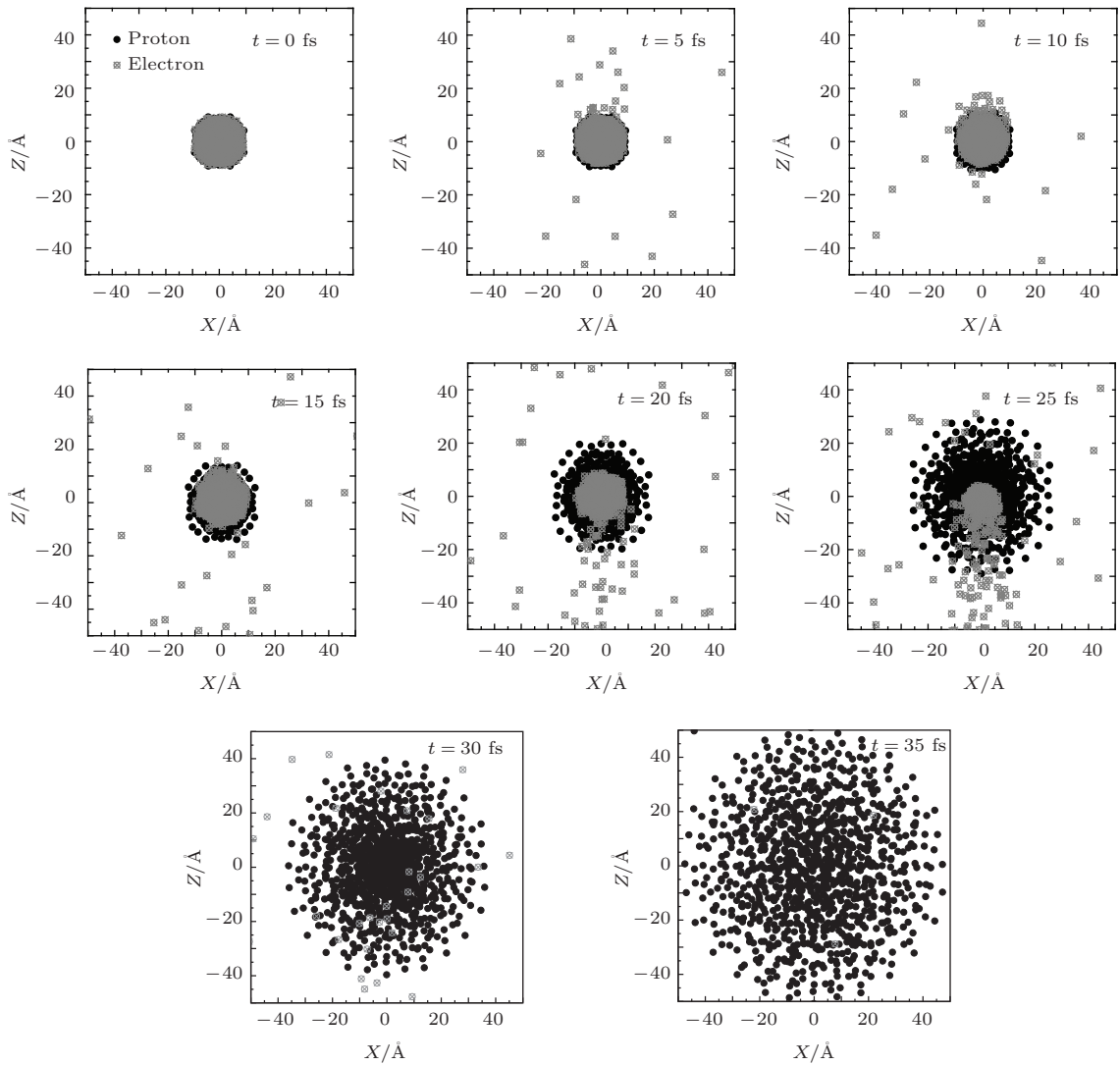


图1 强激光场下团簇构象随时间的变化

Fig. 1. Snapshots of the particle positions at various time from the start of laser pulse  $t = 0$  fs to  $t = 35$  fs.

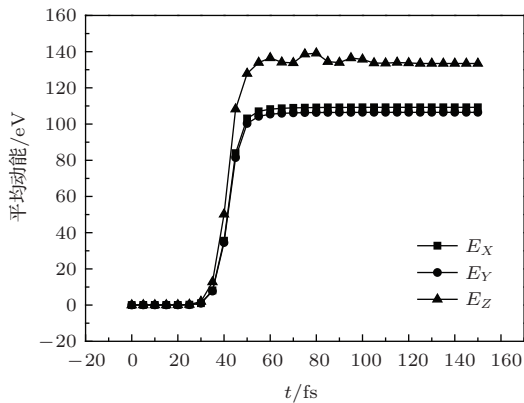


图2 激光强度  $I = 1 \times 10^{17}$  W/cm<sup>2</sup> 时质子各能量分量随时间的变化

Fig. 2. Time evolution of proton energy components at  $I = 1 \times 10^{17}$  W/cm<sup>2</sup>.

为了更加清晰地呈现质子平均动能分布的各向异性程度, 本文引入  $\eta = E_Z/E_X$  来表示质

子平均动能分布的各向异性程度. 图3为强度  $I = 1 \times 10^{17}$  W/cm<sup>2</sup>、脉宽  $T = 60$  fs、波长  $\lambda = 800$  nm 的激光与半径  $r = 6.64$  Å 的团簇相互作用时, 质子平均动能分布的各向异性程度随时间的变化情况, 图3中的插图是内电离发生后激光电场强度的振幅随时间变化的情况. 可以看到, 随着时间的推移, 质子平均动能分布的各向异性程度在内电离后的很短时间内达到某个峰值, 然后开始迅速下降直到趋于某一稳定值. 在内电离发生后的0—15 fs时间内, 团簇内部存在大量自由电子, 这部分电子受激光电场的作用发生抖动, 受3.1节所指出的电子逃逸关联效应的影响, 使得质子平均动能在激光极化方向上的分量明显大于质子平均动能的  $X, Y$  分量. 而在内电离发生后的15—35 fs的时间内, 一方面由于质子在  $X$  轴方向上距离团簇中



心的平均距离要小于Z轴方向距离团簇中心的平均距离,使得质子所受库仑斥力的X, Y分量要大于Z分量;另一方面,由于团簇内部残留的电子很少,电子逃逸引起的关联效应减弱.受上述两方面因素的影响,可以看到质子能量的各向异性程度有所下降.在团簇内电离发生35 fs以后的时间段内,由于电子已几乎被完全剥离团簇,电子逃逸关联效应消失.并且在该时间段内,质子间的距离已经相当大,所以质子平均动能分布的各向异性程度几乎趋于一个稳定值.由图2和图3还可以看出,内电离发生后的60 fs时刻质子能量的Z分量以及各向异性程度出现了一个比较明显的极值,且在图4中可以看到,在该时刻质子间的相互作用势已趋于零,说明导致这一明显极值出现的原因只能是激光场的振荡,对于强度 $I = 1 \times 10^{17} \text{ W/cm}^2$ 的激光,由图3中的内插图可以看到,在内电离发生后

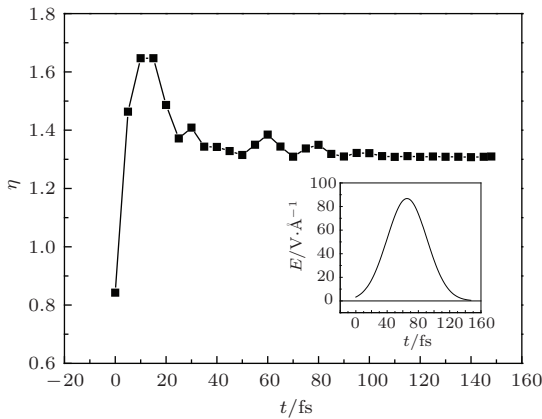


图3 质子平均动能分布的各向异性程度随时间的变化,内插图表示团簇内电离发生后激光电场强度的振幅随时间的变化

Fig. 3. Time evolution of anisotropy degree. The vignette exhibits time evolution of the amplitude of the electric field after inner ionization.

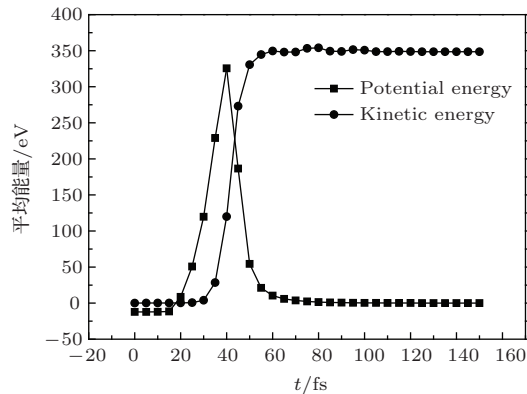


图4 质子的平均动能与平均势能随时间的变化

Fig. 4. Time evolution of average kinetic energy and potential energy of proton.

的50—60 fs,激光经历了3.75个周期,且激光强度的振幅接近于整个脉冲过程的最大值 $86.79 \text{ V/Å}$ ,通过计算,质子在该时间段内由激光场的作用而获得的能量增量为6.4 eV左右,与模拟结果符合.由图3还可看到,当电子云振荡关联效应消失后,质子平均动能的分布仍保持各向异性,且各向异性程度始终大于1.

### 3.3 激光和团簇参数对各向异性的影响

为了弄清质子平均动能的各向异性程度是否受激光和团簇参数的影响,我们计算了不同激光和团簇参数下质子平均动能各向异性程度随时间的变化情况.

图5展示了半径分别为4.98, 6.64, 8.3 Å的团簇与激光( $I = 10^{16} \text{ W/cm}^2, T = 60 \text{ fs}, \lambda = 800 \text{ nm}$ )相互作用时,质子平均动能的各向异性程度随时间的变化情况.由图5可以看到,半径越小,各向异性程度所达到的最大值越大.对于较小的团簇,激光在其上升沿的前几个振荡周期内能够使相对较多的电子逃逸出团簇,这样电子逃逸引起的关联效应也会相对较强,从而使得各向异性程度的最大值越大.

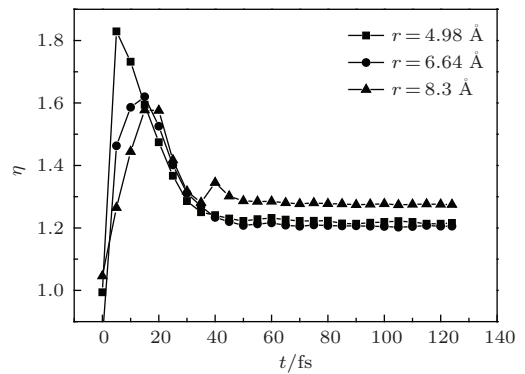


图5 不同尺寸的团簇各向异性程度随时间的变化

Fig. 5. Time evolution of anisotropy degree for cluster with different radius.

图6展示了脉宽 $T = 60 \text{ fs}$ 、波长 $\lambda = 800 \text{ nm}$ 、强度分别为 $10^{15}, 5 \times 10^{15}, 10^{16}, 5 \times 10^{16}, 10^{17}, 5 \times 10^{17}, 10^{18} \text{ W/cm}^2$ 的激光与半径为6.64 Å的团簇相互作用时,质子平均动能的各向异性程度随时间的变化情况.由图6可以看出,激光强度越大,各向异性程度越大.对于相同尺寸的团簇,激光强度越大,每次振荡引起的电子的逃逸数越多,因而电子逃逸关联效应越强.本文还发现,对于强度较高的激光,在电子逃逸关联效应消失后,各向异性程

度出现了不同程度的振荡, 其振荡原因已经在3.2节中做了陈述.

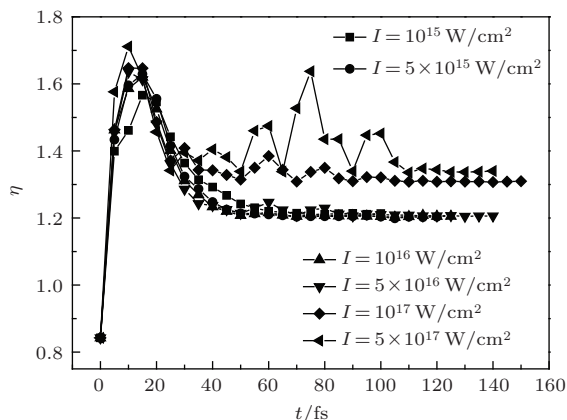


图6 激光强度不同时各向异性程度随时间的变化  
Fig. 6. Time evolution of anisotropy degree for cluster irradiated by laser at different intensity.

图7展示了强度  $I = 10^{16} \text{ W/cm}^2$ 、波长  $\lambda = 800 \text{ nm}$ 、脉宽分别为29, 45, 60, 90, 120 fs的激光与半径为6.64 Å的团簇相互作用时, 质子平均动能的各向异性程度随时间的变化情况. 由图7可以看出, 激光脉宽越宽, 各向异性程度的最大值越小. 这是由于对于强度相同而脉宽不同的激光, 脉宽越窄, 激光脉冲的上升沿越陡峭, 则在团簇内电离发生后相同的时刻, 脉宽越窄, 激光强度越大, 逃逸出团簇的电子数越多, 电子逃逸关联效应越强, 因而各向异性程度越强.

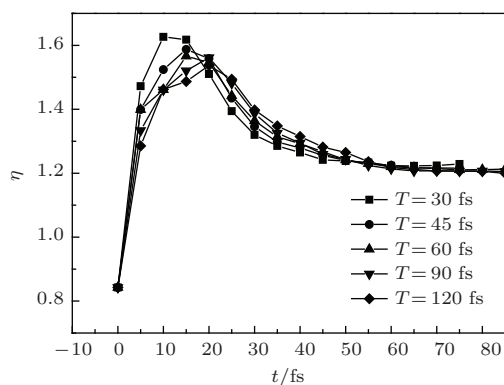


图7 激光脉宽不同时各向异性程度随时间的变化  
Fig. 7. Time evolution of anisotropy degree for cluster irradiated by laser with different pulse width.

图8展示了强度  $I = 10^{16} \text{ W/cm}^2$ 、脉宽  $T = 60 \text{ fs}$ 、波长分别为400, 800, 1058, 3090, 6408 nm的激光与半径为6.64 Å的团簇相互作用时, 质子平均动能的各向异性程度随时间的变化情况. 由图8可以看到, 激光波长越长, 各向异性程度的

最大值越大. 这是由于对于强度、脉宽均相同而波长不同的激光, 波长越长, 激光振动的周期越长, 电子逃逸关联累积效应越强, 从而使得各向异性程度越大. 并且由图8可见, 波长越长, 各向异性程度抖动得越厉害, 特别是激光波长为6408 nm的情况, 可以看到无论电子逃逸关联效应存在还是消失, 各向异性程度都出现了明显的振荡. 引起这种现象的原因在于: 对于长波激光, 在其振荡的某半个周期内能够使质子在其偏振方向上获得较大的能量增量, 从而观察到了各向异性程度明显的振荡现象.

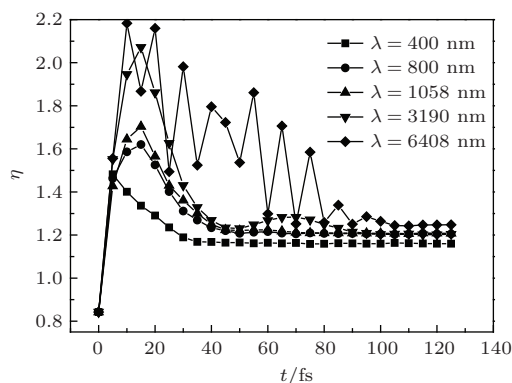


图8 激光波长不同时各向异性程度随时间的变化  
Fig. 8. Time evolution of anisotropy degree for cluster irradiated by laser with different wavelength.

## 4 结 论

本文利用分子动力学模拟方法研究了飞秒激光场下氢团簇的动力学行为. 通过考察飞秒激光场中团簇的构象以及质子平均动能的各分量随时间的变化情况, 发现氢团簇的膨胀呈各向异性; 讨论了各向异性产生的原因, 认为电子逃逸引起的两关联效应是导致团簇各向异性膨胀的根源; 通过模拟发现激光和团簇的参数对团簇膨胀的各向异性程度有很大影响.

## 参考文献

- [1] Ditmire T, Smith R A, Tisch J W G, Hutchinson M H R 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 3121
- [2] Lin J Q, Zhang J, Li Y J, Chen L M, Lü T Z, Teng H 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 457 (in Chinese) [林景全, 张杰, 李英骏, 陈黎明, 吕铁铮, 滕浩 2001 物理学报 **50** 457]
- [3] Li H Y, Liu J S, Wang C, Ni G Q, Li R X, Xu Z Z 2006 *Phys. Rev. A* **74** 023201
- [4] Ditmire T, Donnelly T, Rubenckik A M, Falcone R W, Perry M D 1996 *Phys. Rev. A* **53** 3379

- [5] Ditmire T, Tisch J W G, Sprimpring E, Mason M B, Hay N, Smith R A, Marangos J, Hutchinson M H R 1997 *Nature* **386** 54
- [6] Last I, Jorthner J 1999 *Phys. Rev. A* **60** 2215
- [7] Schtürer M, Ter-Avetisyan S, Stiel H, Vogt U, Radloff W, Kalashnikov M, Sandner W, Nickles P V 2001 *Eur. Phys. J. D* **14** 331
- [8] McPherson A, Luk T S, Thompson B D, Borisov A B, Shiryayev B, Chen X, Boyer K, Rhodes C K 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 1810
- [9] Ditmire T, Donnelly T, Falcione R W, Perry M D 1995 *Phys. Rev. Lett.* **75** 3122
- [10] McPherson A, Thompson B D, Borisov A B, Boyer K, Rhodes C K 1994 *Nature* **370** 631
- [11] Krause J L, Schafer K J, Kulander K C 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 3535
- [12] Velotta R, Hay N, Mason M B, Castillejo M, Marangos J P 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 183901
- [13] Ditmire T, Tisch J W, Yanovsky V P, Cowan T E, Hays G, Wharton K B 1999 *Nature* **398** 489
- [14] Zweiback J, Cowan T E, Hartley J H, Howell R, Wharton K B, Crane J K, Yanovsky V P, Hays G 2002 *Phys. Plasmas* **9** 3108
- [15] Donnelly T D, Ditmire T, Neuman K, Perry M D, Falcione R W 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 2472
- [16] Mendham K J, Hay N, Mason M B, Tisch J W G, Marangos J P 2001 *Phys. Rev. A* **64** 055201
- [17] Dammasch M, Dörr M, Eichmann U, Lenz E, Sandner W 2001 *Phys. Rev. A* **64** 061402
- [18] Lebeault M A, Viallon J, Chevaleyre J, Ellert C, Normand D, Schmidt M, Sublemontier O, Guet C, Huber B 2002 *Eur. Phys. J. D* **20** 233
- [19] Vozzi C, Nisoli M, Caumes J P, Sansone G, Stagira S, De-Silvestri S, Vecchiocattivi M, Bassi D, Pascolini M, Poletto L, Villoresi P, Tondello G 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 111121
- [20] Sun Y Q, Chen L M, Zhang L, Mao J Y, Liu F, Li D Z, Liu C, Li W C, Wang Z H, Li Y J, Wei Z Y, Zhang J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 075206 (in Chinese) [孙彦乾, 陈黎明, 张璐, 毛婧一, 刘峰, 李大章, 刘成, 李伟昌, 王兆华, 李英俊, 魏志义, 张杰 2012 物理学报 **61** 075206]
- [21] Rozet J P, Cornille M, Dobosz S, Dubau J, Gauthier J C, Jacquemot S, Lamour E, Lezius M, Normand D, Schmidt M, Vernhet D 2001 *Phys. Scr. T* **92** 113
- [22] Kumarappan V, Krishnamurthy M 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 085005
- [23] Kumarappan V, Krishnamurthy M, Mathur D 2002 *Phys. Rev. A* **66** 033203
- [24] Krishnamurthy M, Mathur D, Kumarappan V 2004 *Phys. Rev. A* **69** 033202
- [25] Hirokane M, Shimizu S, Hashida M, Okada S, Okihara S, Sato F, Iida T, Sakabe S 2004 *Phys. Rev. A* **69** 063201
- [26] Fennel T, Bertsch G F, Meiwes-Broer K H 2004 *Eur. Phys. J. D* **29** 367
- [27] Jungreuthmayer C, Geissler M, Zanghellini J, Brabec T 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 133401
- [28] Symes D R, Hohenberger M, Henig A, Ditmire T 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 123401
- [29] Li H Y, Liu J S, Wang C, Ni G Q, Li R X, Xu Z Z 2006 *Phys. Rev. A* **74** 343
- [30] Milchberg H M, McNaught S J, Parra E 2001 *Phys. Rev. E* **64** 056402
- [31] Zhang C Y, Zhao Q, Fu L B, Liu J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 143601 (in Chinese) [张春艳, 赵清, 傅立斌, 刘杰 2012 物理学报 **61** 143601]
- [32] Cheng R, Zhang C Y, Fu L B, Liu J 2015 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **48** 035601
- [33] Augst S, Meyerhofer D D, Strickland D, Chint S L 1991 *J. Opt. Soc. Am. B* **8** 858
- [34] Last I, Jortner J 2000 *Phys. Rev. A* **62** 013201

# Dynamic behavior of hydrogen clusters under intense femtosecond laser\*

Zhang Chun-Yan<sup>†</sup> Liu Xian-Ming

(School of Science, Hubei Minzu University, Enshi 445000, China)

( Received 3 April 2015; revised manuscript received 21 April 2015 )

## Abstract

The molecular dynamics model is adopted to investigate the dynamical behavior of hydrogen cluster irradiated by an intense femtosecond laser. Being contrary to the predictions from the Coulomb explosion model, this paper points out that the explosion of hydrogen cluster is anisotropic. The component of proton energy along the laser polarization direction is much larger than the component perpendicular to the polarization direction. This paper discusses the mechanism responsible for the anisotropic explosion. In the process of the interaction of femtosecond laser with cluster, the electrons undergo the inner ionization and then oscillate along the direction of laser polarization. During the oscillation of electrons, part of them will escape from cluster. The escaping of the electrons would lead to two correlation effects. First, the anisotropic distribution of the electric field caused by the oscillation of electrons would not be neutralized. For one thing, during the oscillating of electrons, they will be pulled to one pole of cluster so the electric field of the opposite pole would be larger, the electrons in this region will experience larger Coulomb repulsive force and gain larger acceleration. For another thing, the electron number contained in the cluster will decline during each laser cycle. So the proton in this region will gain a pure acceleration. Second, during the oscillation of electrons, part of electrons will escape from cluster. During their escaping they will pull the protons at the pole and the protons move toward the direction of electron escaping direction. These two correlation effects cause the anisotropic explosion of hydrogen cluster. This paper also discusses the influences of cluster and laser parameters on the degree of anisotropy.

**Keywords:** intense femtosecond laser field, hydrogen cluster, anisotropic explosion, molecule dynamics simulation

**PACS:** 36.40.-c, 52.50.Jm

**DOI:** [10.7498/aps.64.163601](https://doi.org/10.7498/aps.64.163601)

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11365008, 51408204).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [15210529496@163.com](mailto:15210529496@163.com)