

超快强场下低能光电子的研究进展——解析 R 矩阵半经典轨迹理论

黄文道 张逸竹 阎天民 江玉海

Progress in study of low-energy photoelectron in ultra-fast strong fields-analytical R-matrix theory based semiclassical trajectory method

Huang Wen-Xiao Zhang Yi-Zhu Yan Tian-Min Jiang Yu-Hai

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 223204 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.223204

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.223204>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I22>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

非均匀激光场中氢分子离子高次谐波的增强

Enhancement of high-order harmonic generation from H_2^+ in near plasmon-enhanced laser field

物理学报.2016, 65(12): 123201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.123201>

调制激光场中 Rydberg 原子的电磁感应透明

Electromagnetically induced transparency of Rydberg atoms in modulated laser fields

物理学报.2016, 65(10): 103201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.103201>

红外激光场中共振结构原子对极紫外光脉冲的压缩效应

Compression of extreme ultraviolet pulse for atom with resonant structure exposed to an infrared laser field

物理学报.2016, 65(10): 103202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.103202>

氢负离子在少周期激光场中解离时的干涉效应

Interference effect in the photodetachment from H^- ion in a few-cycle laser pulse

物理学报.2016, 65(8): 083202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.083202>

激光驱动晶体发射高次谐波的特性研究

Study of high-order harmonic generation in crystals exposed to laser fields

物理学报.2016, 65(6): 063201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.063201>

专题: 超快强激光驱动的原子的分子过程

超快强场下低能光电子的研究进展
——解析 R 矩阵半经典轨迹理论*黄文道¹⁾²⁾ 张逸竹¹⁾ 阎天民^{1)†} 江玉海^{1)2)3)‡}¹⁾(中国科学院上海高等研究院, 上海 201210)²⁾(中国科学院大学, 北京 100049)³⁾(上海科技大学, 上海 201210)

(2016 年 10 月 9 日收到; 2016 年 11 月 1 日收到修改稿)

该综述回顾了近期解析 R 矩阵方法结合半经典理论的发展, 介绍其应用于线偏振光场下单活跃电子系统中的求解强场电离概率幅的过程 [Torlina L, Smirnova O 2012 *Phys. Rev. A* **86** 043408]. 解析 R 矩阵方法通过内外区域分割, 可以获得对外区光电子的半解析描述. 内区能够提供良好定义的边界条件, 外区光电子波函数则可近似为 Eikonal-Volkov 解. 进一步, 使用稳相近似, 可以将电离概率幅中的积分近似为半经典轨迹及相应相因子对应的分量之和. 基于该方法讨论了不同电离时刻隧穿而出波包的形状, 近似表现为以半经典轨线为中心的高斯型. 在外光场与库仑势同时存在的情况下, 亚周期非绝热修正对电离概率有不同的影响. 作为特殊的案例, 文中重点讨论在复时间平面上使用纯光驱动轨迹与库仑修正相因子研究光电子返回母核附近发生软回碰过程中的一系列关键环节以及对低能结构的影响 [Pisanty E, Ivanov M 2016 *Phys. Rev. A* **93** 043408]. 在引入库仑势后, 使用传统积分曲线存在一定的问题, 因积分路径可能遭遇分支-切割面导致积分函数丧失解析性. 为了克服该问题, 隧穿电离后演化过程的时间被拓展到复平面, 电子轨迹允许具有虚部. 当回碰发生时, 需要谨慎处理复时间平面上的分支-切割面. 研究发现, 复平面上的导航方法与最接近时间有关, 最接近时间总存在于一对分支-切割面之间, 它可以帮助规避不连续路径. 最接近时间解的集合形成丰富的几何结构, 使电子在回碰过程中表现出有趣的性质, 与低能结构有关的回碰信息就隐藏在这些几何结构中, 我们讨论了最接近时间方程解的拓扑结构随参数的变化以及设计路径搜索算法的依据, 介绍了实验上与低能结构相关的可能观测到的现象.

关键词: 阈上电离, 半经典理论, 解析 R 矩阵方法, 复时间方法**PACS:** 32.80.Rm, 42.50.Hz, 33.80.Wz**DOI:** 10.7498/aps.65.223204

1 引言

原子分子与强场激光相互作用会展现出丰富的特性, 如何描述横跨大范围能量尺度的非微扰现象是理论工作中的一个难题. 本文主要回顾近期结合半经典轨迹技术的解析 R 矩阵理论用于光电子

谱中低能结构分析的发展.

近些年来发现的中红外强场下原子的光电子能谱的低能区域出现的一系列特殊现象, 例证之一便是低能结构 (low-energy structure, LES) 的出现 [1,2]. 在长波长强场光电离过程中, 人们发现光电子峰中除了一般的阈上电离外, 还出现了能量值远低于场中电子平均能量的峰. LES 的特殊之

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2013CB922200)、国家自然科学基金 (批准号: 11420101003, 11274232, 11604347, 61675213, 91636105) 和上海科委扬帆计划 (批准号: 16YF1412600) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yantm@sari.ac.cn

‡ 通信作者. E-mail: jiangyh@sari.ac.cn

处在于它的出现与强场近似理论 (strong field approximation, SFA) 的预言相悖. 根据 SFA 理论, 光电子谱在低能区中应当是光滑的、没有特殊结构的, 并且当外光场频率降低、系统深入到光学隧穿区的时候, 人们本期望 SFA 能更精确地描述强场现象. 这激发了人们发展用于描述低能结构的理论方法、识别产生低能结构物理机制的兴趣.

第一性原理的含时薛定谔方程 (time-dependent Schrödinger equation, TDSE) 数值模拟能重现 LES, 通过对比包含与不包含长程库仑势的计算结果, 可以表明库仑相互作用对 LES 的产生具有决定性作用. 不过, 在长波长情况下, TDSE 的求解相当耗时, 且其结果难以分析, 很多物理机制没有明确的图像. 人们需要借助其他的近似手段, 其中最为直接的是经典轨迹方法, 它同样可以重现 LES 现象. 同时包含外光场与库仑场效应的经典轨迹蒙特卡罗模拟 (classical trajectory Monte Carlo, CTMC) [3–5] 支持了长程库仑势对 LES 的作用的解释, 它将 LES 的成因归结为库仑场对回碰光电子的前向散射.

半经典近似是相比于经典轨迹更为精细的理论描述方法. 通过对散射矩阵元进行 Dyson 级数展开, 在已有的处于连续态电子的基础上, 通过包含高阶项可引入母核势的效应, 人们能够处理高阶阈上电离 (high-order above-threshold ionization, HATI) [6–8]. 但 HATI 主要针对具有 $2U_p$ — $10U_p$ 范围具有更高能量的光电子, 而 LES 则是低能区的现象. 为了解释低能区库仑效应, 人们发展了基于轨迹的库仑修正强场近似 (trajectory-based Coulomb-corrected strong field approximation, TCSFA) 方法 [9–11], 对 SFA 电离概率幅进行重写以包含库仑场对轨迹的效应, 结果同样指向了前向散射电子. 在 TCSFA 方法中, 轨迹遵循了在电场与库仑场混合作用下的经典运动方程, 从本质上说, TCSFA 中体现的 LES 特征依然源于复合场中经典轨迹的性质. 除了典型的 LES 外, 一系列更低能区的谱特征也被发现, 包括极低能结构 (very-low-energy structure, VLES) [12]、零能结构 (zero-energy structure, ZES) (或称为近零能结构 NZES) [13–15] 等. 尽管现象繁多, 但其产生的根源均与复合场共同作用有关, 其中多数现象均在经典轨迹的框架下获得解释. 当然, 基于复合场轨迹下的半经典方法也能够复现这些实验特征.

近些年来发展的解析 R 矩阵方法 (analytical R-matrix, ARM) [16,17] 则对低能谱现象有新的见解 [18]. ARM 方法在波函数的相因子中包含了库仑场效应, 也可解析地结合半经典轨迹技术用于研究 LES 的产生机制. 最近的一项工作表明, 即使舍弃以往 (半) 经典方法中使用的复合场驱动下的轨迹, 认为库仑场中发生散射的程度较弱, 在低能区的散射为软回碰的假设下, 人们也应当能够观测到一系列由母核势导致的低能区电离率变化. 分析暗示 LES 的本质根植于 simple-man 模型中纯光场驱动下的轨迹, 库仑势的作用只是通过库仑修正相位因子增强或减弱了这些轨迹的贡献. 这产生了一个可能性, 即发生软回碰的一系列轨迹可以解释最近实验光电子谱中观测到的一系列显著的峰. 此外, 进一步扩展该轨迹系列能够证明实际上有两类软回碰轨迹在电离后半周期的奇数或偶数倍时刻处回碰母核离子. 先前描述的轨迹在半个周期的奇数倍时间处发生回碰, 其漂移能量是有质动力势 U_p 的常数倍. 与之对比的是, 在整数倍激光周期处发生软回碰的轨迹具有更低的能量, 大约在 1 meV, 与 U_p 的尺度关系呈 $1/U_p$, 低能轨迹意味着产生的峰可能对 NZES 有贡献.

本文下面的内容分为两个部分: 第一部分中首先回顾 ARM 方法的基本原理 [16], 介绍 ARM 应用于线偏振光场下的求解强场电离概率幅的过程, 其中引入了半经典近似, 为轨迹方法的使用奠定了基础; 第二部分介绍了文献 [18] 在 ARM 方法框架上进行半经典轨迹分析得到的一系列新颖结论, 重点回顾在复时间平面上使用纯光驱动轨迹研究软回碰过程影响低能结构的一系列关键环节, 特别是如何处理积分路径在复值时间平面上遭遇到由库仑项形成的分支切割面的情况, 以及提出利用最接近时间来规避分支切割面的解决方案, 讨论了最接近时间方程解的拓扑结构随参数的变化以及如何据此设计路径搜索算法. 基于轨迹分析, 提出了实验上可能观测到的低能峰与电离被抑制的沟道现象, 以及软回碰轨迹与 U_p 的尺度关系.

2 解析 R 矩阵方法的基本原理

2.1 ARM 概述

ARM 方法最初用于线偏振光场下的电离过程 [16], 也用于研究母核附近多电子与光电子关联

对电离的影响^[17]、圆偏振场下的电离问题^[19,20]等。R 矩阵方法的主要思想来源于对碰撞过程与核共振反应的理论处理,它分离了由母核影响主导的区域与其外的区域。在外区域中,研究对象与母核相互作用较弱,使用渐进近似可方便地处理。

作为描述散射与电离过程的一种有效手段,在 R 矩阵方法中,空间被分隔为内外两个区域。空间分隔反映了两个子系统下不同的动力学过程,但子系统间又彼此耦合。对于外区,电子距离母核足够远,电子与母核间相互作用可被简化(例如,忽略电子的交换势)。对于内区,尽管动力学过程可能十分复杂,有限的内区空间允许将其处理为多电子系统的束缚态。当使用解析方法或半经典方法时,这样的内外分区具有很大的优势。实际上,解析方法遇到的主要困难是难以处理需同时考虑外光场与电子、母核与电子间相互作用的复合场问题。当两种相互作用量级相差较小时,标准的微扰处理失效。但在适当的分区后,外区因为远离母核的库仑奇点,很多解析方法,如 eikonal-Volkov 近似(EVA)^[21],就可以很好地描述动力学过程。在此基础上,甚至可以研究关联作用诱导的不同电离通道间的相互作用,如在一阶微扰理论的基础上,外逸电子与驻留在母核附近的电子间的多电子效应会导致关联诱导激发^[22]。值得注意的是,t-SURFF 方法也是基于 R 矩阵思想^[23-25]解析处理外区动力学的,它在外区连续态波函数演化中使用了 Volkov 态,内区通过边界实现向外区 Volkov 态的过渡。因为 Volkov 态是在无母核势作用的情况下纯激光驱动连续态动力学的精确解,要求将边界的位置设定得足够远,但即使针对长程库仑势,边界位置在 100 a.u. 也能较好地描述动力学过程,它具有对外区计算高效、解析的优势。

结合半经典理论,内区与外区的设计自然地引入了强场作用下进出边界的电子轨迹的概念。电离过程中对波包的解析描述可用于获得起源于内区的电子轨迹,被用作接下来进行演化的初始条件,但电离步骤中涉及的隧穿过程会要求轨迹经过经典禁戒区域,它的处理具有一定的技巧性。轨迹形成并演化后,人们可根据电子往返内区次数的不同对轨迹进行分类获得分量,波函数可分解为分量之和。从强场中电子-离子碰撞模型^[26,27]的角度来看,ARM 公式允许将电子与母核碰撞区分为硬碰撞与软碰撞,软碰撞对应于轨迹处于外区,而硬碰

撞对应于电子轨迹进入内区。硬碰撞下碰撞参数小,散射角度大,在大角度散射下,散射电子从强场中获得更高的能量,而二次回碰这样更高阶的碰撞过程发生的概率要小得多,因此波函数以硬碰撞次数对应分量展开的级数会迅速收敛。

内区的近似处理应考虑处于该区的电子能量,电离过程中,当电子总能量为负时,内区波函数以初始束缚态为主,这为外区的演化提供了一个具有良好定义的源项。当电子在外光场的驱动下移动进入内区,不难设想,电子在内区的停驻时间应当很短,电子与外光场的相互作用可通过微扰方法进行处理^[28]。其中,零阶微扰过程对应于定量再散射理论(quantitative rescattering theory, QRS)^[29,30]中应用无场散射概率幅及重碰撞概率幅加之散射截面来描述的回碰过程,这在散射时间很短的情况下是合理的,但 QRS 无法描述激光场驱动下的回碰效应,如库仑-激光耦合^[31]与激光辅助库仑聚焦^[32]等,而 R 矩阵方法则可较好地描述这些效应,因为它所包含的外区动力学主导了这些过程。另外,ARM 原则上也能很好地描述强场驱动下的时间分辨电子全息成像^[33,34],强散射物波与弱散射参考波之间相互干涉,参考波始终在外区,物波则是波函数中电离后重新进入内区的部分。

2.2 ARM 电离概率幅

ARM 的基本思想是根据系统与外光场、系统与母核势间相互作用主导地位的不同,将空间分为内区与外区。在外区,系统与外光场间的相互作用占主导地位,母核势被看作微扰;而在内区,束缚性质的母核势为主要影响。通过引入一个半径为 a 的球壳实现分区。参数 a 的选择需要满足条件 $1/\kappa \ll a \ll I_p/E_0$,使得该球壳的位置同时远离轨迹隧穿势垒的入口与出口。从内区过渡到外区的动力学过程是通过区间的边界匹配实现的。

分区后,原哈密顿量 $\hat{H}$ 本身在内区或外区为非厄米算符,需要通过引入边界项使得新哈密顿量 $\hat{\mathcal{H}}^\pm \equiv \hat{H} + \hat{L}^\pm(a)$ 重新具有厄米性。边界项 $\hat{L}^\pm(a) = \pm\delta(r-a)\hat{B}$ 包含了 Bloch 算符 $\hat{B} = d/dr + (1-b)/r$,“+”与“-”分别表示内区与外区。由此可获得新的方程 $i\partial_t\psi(\mathbf{r},t) = \hat{\mathcal{H}}^\pm\psi(\mathbf{r},t) - \hat{L}^\pm(a)\psi(\mathbf{r},t)$,并可重写为边界值问题的形式 $i\partial_t\psi(\mathbf{r},t) - \hat{\mathcal{H}}^\pm\psi(\mathbf{r},t) = -\hat{L}^\pm(a)\psi(\mathbf{r},t)$ 。求解非齐次边界值问题可利用相应齐次方程的格

林函数 $G_{\text{out}}^a(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = \langle \mathbf{r} | e^{-i \int_{t'}^t \hat{\mathcal{H}}^{(-)} d\tau} | \mathbf{r}' \rangle$, 可
得外区的波函数为

$$\psi_{\text{out}}(\mathbf{r}, t) = -i \int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^t dt' G_{\text{out}}^a(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') \\ \times [-\hat{L}^-(a)\psi(\mathbf{r}', t')]_{r'=a}.$$

类似地, 内区波函数 $\psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t)$ 呈现相同形式, 区别
仅仅是将 $G_{\text{out}}^a(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t')$ 替换为 $G_{\text{in}}^a(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = \langle \mathbf{r} | e^{-i \int_{t'}^t \hat{\mathcal{H}}^{(+)} d\tau} | \mathbf{r}' \rangle$, 并将 $\hat{L}^-$ 替换为 $\hat{L}^+$.

现在以穿越边界的次数为指标写出一系列的
波函数分量. 对于穿越过一次边界的外区波函数分
量, 边界处的光缀饰波函数可近似为原子波函数的
基态分量, 所得外区波函数为

$$\psi_{\text{out}}^{(1)}(\mathbf{r}, t) \\ = i \int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^t dt' G_{\text{out}}^a(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') \\ \times [\hat{L}^-(a)\psi_g(\mathbf{r}')]|_{r'=a} a_g(t') e^{-iE_g t'}, \quad (1)$$

其中 $a_g(t')$ 包含了内区中无场情况下基态能量 E_g
的 Stark 移位及基态波函数 $\varphi_g(\mathbf{r}')$ 的衰减.

反过来, (1) 式可代入 $\psi_{\text{in}}(\mathbf{r}, t)$, 获得从外区再
进入内区的波包,

$$\psi_{\text{in}}^{(2)}(\mathbf{r}, t) = i \int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^t dt' G_{\text{in}}^a(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') \\ \times [\hat{L}^+(a)\psi_{\text{out}}^{(1)}(\mathbf{r}', t')]_{r'=a'}. \quad (2)$$

下一阶的项为 $\psi_{\text{out}}^{(3)}(\mathbf{r}, t)$, 它描述了逸入外区的波
包进入内区后再次逸入外区等.

接下来的分析可以引入近似方法. 外区中,
 ψ_{out} 部分中的 G_{out}^a 可由 EVA [35] 的解代替. EVA
的时间演化算符 $\mathcal{U}^{\text{EVA}}(t, T)$ 可以精确描述系统在
母核势 $U(r)$ 没有奇点情况下的强场电离过程, 适
宜处理 ARM 的外区. 不过, EVA 演化算符允许波
包在边界处同时流入流出, 这与真正的演化算符只
允许波函数流出相悖. 幸运的是, 强场电离中流入
的部分需要穿越额外的经典禁戒区, 而隧穿概率指
数衰减, 因此流入部分的影响可以忽略.

EVA 态 $|\mathbf{p}_T^{\text{EVA}}(t)\rangle$ 是由无外光场情况下
eikonal 连续态 $|\mathbf{p}^{\text{E}}\rangle$ 从 T 起、到 t 止的后向演
化定义的, $|\mathbf{p}_T^{\text{EVA}}(t)\rangle = \mathcal{U}^{\text{EVA}}(t, T)|\mathbf{p}^{\text{E}}\rangle$, 其中 T 为
脉冲的结束时刻, t 为脉冲的开始时刻. $|\mathbf{p}^{\text{E}}\rangle$ 中的
E 代表“eikonal”, $\mathbf{p}$ 为渐进动量. 在空间表象下,
 $\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}^{\text{E}} \rangle = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} e^{iG_{0\mathbf{p}}(\mathbf{r})}$, 其中, $G_{0\mathbf{p}}(\mathbf{r})$ 描
述了相前在位置 $\mathbf{r}$ 处相比平面波发生的形变. 后

向演化中, 可将 $|\mathbf{p}^{\text{E}}\rangle$ 作为 EVA 态从 T 时刻起的
初始条件. 演化后, 可得 $|\mathbf{p}_T^{\text{EVA}}(t)\rangle$ 的表达式,

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_T^{\text{EVA}}(t) \rangle \\ = (2\pi)^{-3/2} e^{i[\mathbf{p}+\mathbf{A}(t)]\cdot\mathbf{r} - \frac{i}{2} \int_T^t d\tau [\mathbf{p}+\mathbf{A}(\tau)]^2} \\ \times e^{-i \int_T^t d\tau U(\mathbf{r}_L(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{p}, t))} e^{iG_{0\mathbf{p}}(\mathbf{r}_L(T; \mathbf{r}, \mathbf{p}, t))},$$

上式第一行为 Volkov 波函数, $\mathbf{A}(t)$ 为矢势, 与电
场 $\mathbf{F}(t)$ 的关系满足 $\mathbf{F}(t) = -\partial_t \mathbf{A}(t)$; 第二行首项
代表母核诱导的相前形变, 第二项为无场态的相前
形变, 保证了 T 时刻处波函数与 EVA 态的连续衔
接. 其中,

$$\mathbf{r}_L(\tau) \equiv \mathbf{r}_L(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \mathbf{r} + \int_t^\tau dt'' [\mathbf{p} + \mathbf{A}(t'')]$$

代表了始于时刻 t , 从 $\mathbf{r}$ 点出发, 末态渐进动量为 $\mathbf{p}$
的轨迹. 无场态的相形变 $G_{0\mathbf{p}}(\mathbf{r}_L(T; \mathbf{r}, \mathbf{p}, t))$ 保证
了解的连续性, 当 $t = T \rightarrow \infty$ 时, $\mathbf{r}_L(T; a, \mathbf{p}, t) \rightarrow$
 ∞ , $G_{0\mathbf{p}}(\mathbf{r}_L(T; \mathbf{r}, \mathbf{p}, t)) \rightarrow 1$ 等价于在无限远处将
eikonal 初始条件替换为平面波, 当波前向母核方
向后向传播时, 平面波前在光场与母核势作用的共
同影响下发生形变, 不断累积. 利用 EVA 态, EVA
格林函数为

$$G^{\text{EVA}}(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') = \langle \mathbf{r} | \mathcal{U}^{\text{EVA}}(t, t') | \mathbf{r}' \rangle \\ = \theta(t - t') \int d\mathbf{p} \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}_T^{\text{EVA}}(t) \rangle \langle \mathbf{p}_T^{\text{EVA}}(t') | \mathbf{r}' \rangle,$$

将其代入 (1) 式可计算外区波函数 $\psi_{\text{out}}^{(1)}(\mathbf{r}, t)$. 由
Bloch 算符的边界性可知, 构造 EVA 态与 EVA 格
林函数的相关轨迹均来自边界, 处于外区的轨迹
对应于直接电离的电子. 由 EVA 格林函数写出的
 $\psi_{\text{out}}^{(1)}(\mathbf{r}, t)$ 可进一步通过鞍点方法进行分析.

为了获取电离概率幅, 可将上面得到的 ψ_{out}
投影到无场 eikonal 连续态 $|\mathbf{p}^{\text{E}}\rangle$ 上, $a_{\mathbf{p}}(T) =$
 $\int_a d\mathbf{r} \langle \mathbf{p}^{\text{E}} | \mathbf{r} \rangle \psi_{\text{out}}(\mathbf{r}, T)$, 其中, $\int_a$ 表示对外区空间
进行积分. 当 $T \rightarrow \infty$ 时, 电子波包距离母核
足够远, 可投影到平面波连续态上获得电离概率
幅, $a_{\mathbf{p}}(T) = \int_a d\mathbf{r} \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \psi_{\text{out}}(\mathbf{r}, T)$. 将 G^{EVA} 代入
 ψ_{out} , 并利用 EVA 态之间的正交关系, 电离概率幅
的通式为

$$a_{\mathbf{p}}(T) \\ = -i \int dt' e^{-\frac{i}{2} \int_{t'}^T d\tau [\mathbf{p}+\mathbf{A}(\tau)]^2} \\ \times \int \frac{d\mathbf{r}'}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i \int_{t'}^T d\tau U(\mathbf{r}_L(\tau))} e^{-i[\mathbf{p}+\mathbf{A}(t')]\cdot\mathbf{r}'}$$

$$\times \delta(r' - a) \hat{B} \Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}', t'). \quad (3)$$

需要注意的是, 上式 $a_{\mathbf{p}}(T)$ 只适用于直接光电子, 不适合描述与母核发生硬回碰的情况.

3 线偏振光下半周期内的电离概率幅

接下来将应用上一节中得到的结论, 具体推导 ARM 应用于半个周期线偏振光场中类氢原子的电离概率幅, 其中将引入半经典近似, 与轨迹分析建立联系. 半个周期光场下的电离结果可方便地推广到光场包含多个周期的情况.

边界上 $r' = a$ 处的基态波函数 $\Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}', t') \simeq e^{iI_{\text{p}}t'} a_{\text{g}}(t') \psi_{\text{g}}(\mathbf{r}')$, 其中 $a_{\text{g}}(t')$ 包含了 Stark 移位及基态衰减, $\psi_{\text{g}}(\mathbf{r}')$ 则为空间波函数. 对于运动在库仑势场 $U(r) = -Q/r$ 中的类氢原子, $\psi_{\text{g}}(\mathbf{r}) = \varphi_{\kappa,l}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$, 其中, 空间波函数的径向部分 $\varphi_{\kappa,l}(r) = C_{\kappa l} \kappa^{3/2} e^{-\kappa r} (\kappa r)^{Q/\kappa} / \kappa r$, $\kappa = \sqrt{2I_{\text{p}}}$ 对应于束缚态原子的特征动量, I_{p} 为电离能, $1/\kappa$ 为束缚态原子的特征尺度, $C_{\kappa l}$ 为常量. 如果在描述边界性质的 Bloch 算符中, 令 $b = Q/\kappa$, 易证 $\hat{B} \varphi_{\kappa,l}(r) = -\kappa \varphi_{\kappa,l}(r)$.

假定在线偏振光场下, 场偏振方向沿 z 方向, 电场分量 $\mathbf{E}(t) = F \cos \omega t \hat{e}_z$, 矢势 $\mathbf{A}(t) = -(F/\omega) \sin \omega t \hat{e}_z$, 将边界上的波函数 $\Psi_{\text{in}}(\mathbf{r}', t')$ 代入 (3) 式, 可得电离率^[16]

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{p}}(T) = & \frac{i\kappa}{(2\pi)^{3/2}} a^2 \varphi_{\kappa,l}(a) e^{-i\frac{p_{\perp}^2}{2}T} \\ & \times \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{lm}(\theta, \phi) \\ & \times e^{-i a p_{\perp} \sin \theta \cos(\phi - \phi_{\text{p}})} \\ & \times \int_{t'}^T dt' a_{\text{g}}(t') e^{-i S_V(T, t', \mathbf{p})} e^{-i \sigma_U(t')} \\ & \times e^{-i v_z(t') a \cos \theta}, \end{aligned} \quad (4)$$

其中

$$\begin{aligned} S_V(T, t', \mathbf{p}) = & \frac{1}{2} \int_{t'}^T d\tau v_z(\tau)^2 - \left(I_{\text{p}} + \frac{p_{\perp}^2}{2} \right) t', \\ v_z(t') = & p_{\parallel} + A(t'), \\ \sigma_U(t') = & \int_{t'}^T d\tau U[\mathbf{r}_L(\tau; \theta, \mathbf{p}, t')], \end{aligned} \quad (5)$$

且定义 $p_{\parallel} = p_z$, $p_{\perp}^2 = p_x^2 + p_y^2$, ϕ_{p} 为垂直动量 $p_{\perp}$ 与 x 轴间的夹角. (4) 式的第二行为空间积分, 第三行为时间积分.

时间积分项中, 被积函数包含高频振荡部分, 在长波长情况下, 这类积分可通过渐进展开得以简

化. 利用鞍点近似条件, 在假定 $\sigma_U(t')$ 相比 $S_V(t')$ 变化很慢的情况下, 令指数部分的导数为零, 可获得边界处的鞍点方程:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} [p_{\parallel} + A(t')]^2 \\ & + \left[I_{\text{p}} + \frac{p_{\perp}^2}{2} + F a \cos \theta \cos \omega t' \right] = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

若鞍点方程的解为 $t' = t_a$, 鞍点近似后 $a_{\mathbf{p}}(T)$ 可简化为

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{p}}(T) = & \frac{i\kappa}{(2\pi)^{3/2}} a^2 \varphi_{\kappa,l}(a) e^{-i\frac{p_{\perp}^2}{2}T} \\ & \times \int_0^{\pi} d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi Y_{lm}(\theta, \phi) \\ & \times e^{-i a p_{\perp} \sin \theta \cos(\phi - \phi_{\text{p}})} \\ & \times \frac{\sqrt{2\pi} a_{\text{g}}(t_a)}{\sqrt{|S_V''(t_a) + A''(t_a) a \cos \theta|}} \\ & \times e^{-i S_V(t_a)} e^{-i \sigma_U(t_a)} e^{-i v_z(t_a) a \cos \theta}. \end{aligned} \quad (7)$$

如果按照 TCSFA 中鞍点方程的定义, t_s 是方程 $\frac{1}{2} [p_{\parallel} + A(t_s)]^2 + p_{\perp}^2 = -I_{\text{p}}$ 的鞍点解, 由划分内区时要求 $Fa \ll I_{\text{p}}$, 可以证明 $t_a \simeq t_s$, ARM 与 TCSFA 中所使用的鞍点方程区别在于 (6) 式中的最后一项 $F(a) \cos \theta \cos \omega t'$. 在时间变量积分后所得 (7) 式的基础上, 继续对空间变量进行积分. 利用贝塞尔函数的积分公式可显式求解对变量 ϕ 的积分, $\int_0^{2\pi} d\phi' \exp[-i a p_{\perp} \sin \theta \cos \phi' + i m \phi'] = 2\pi (-i)^m J_m(p_{\perp} a \sin \theta)$. 在对 θ 进行积分处理时, 因电离率最高的方向在 $\theta = \pi$ 附近, 可做变换 $\theta' = \pi - \theta$, 并对 θ' 进行小角度展开, 经过一系列推导, 最终可获得线偏振光场下的电离概率幅:

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{p}}(T) \simeq & \frac{(-1)^{l+m} i^{m+1}}{\sqrt{|S_V''(t_s)|}} C_{lm} e^{i m \phi_{\text{p}}} e^{-i\frac{p_{\perp}^2}{2}T} \left[\frac{p_{\perp}}{\kappa} \right]^m \\ & \times e^{-\frac{i}{2} \int_{t_s}^T d\tau [p_{\parallel} + A(\tau)]^2 + i(I_{\text{p}} + p_{\perp}^2/2)t_s} a_{\text{g}}(t_s) \\ & \times \varphi_{\kappa,l}(a) a e^{-i \int_{t_a}^T d\tau U(-a + \int_{t_a}^{\tau} [p_{\parallel} + A(t'')] dt'')}, \end{aligned} \quad (8)$$

其中 $C_{lm} = \frac{1}{2^m m!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}}$. 注意, 电离率在原则上应与边界的选取无关, 但 $a_{\mathbf{p}}(T)$ 的最后一项中出现了边界 a , 这是因为在解析推导的过程中使用了近似处理, 人为假定了内区波函数未受外场影响, 而外区受到外光场的作用. 实际上, 通过

证明束缚势 U 中的 a 与空间波函数部分的 a 相消, 可以证明 $a_{\mathbf{p}}(T)$ 与人为选取的边界 a 无关.

对于类氢原子电离概率幅的计算, 可以将类氢原子空间波函数 $\varphi_{\kappa,l}(a)$ 代入 (8) 式中, 对边界 a 的依赖关系可与 (8) 式最后一项合并而被处理掉, 进一步可获得半周期内的电离概率幅:

$$a_{\mathbf{p}}(T) \simeq R_{\kappa lm}(\mathbf{p}) a_g(t_s) e^{-i\frac{p_{\perp}^2}{2}T} \times e^{-i \int_{t_{\kappa}}^T d\tau U(\int_{t_s}^{\tau} dt'' [p_{\parallel} + A(t'')])} \times e^{-\frac{i}{2} \int_{t_s}^T d\tau [p_{\parallel} + A(\tau)]^2 + i(I_p + p_{\perp}^2/2)t_s}, \quad (9)$$

其中的积分限 $t_{\kappa} = t_s - i/\kappa^2$ 被平移到了 t_s 的下方, 这个平移来自对外区波函数与束缚态波函数 WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) 渐进解的匹配条件. 第一行中, 首项

$$R_{\kappa lm}(\mathbf{p}) = \frac{(-1)^{l+m} i^{m+1}}{\sqrt{S_V''(T, t_s)}} C_{lm} \times e^{im\phi_p} \left[\frac{p_{\perp}}{\kappa} \right]^m C_{\kappa l} \kappa^{1/2} \quad (10)$$

描述了波函数的角向结构对电离过程的影响. (9) 式的第二行体现了库仑势的贡献, 动量集中分布在 $p = 0$ 处, 对应在外电场的峰值时发生电离, 这与 PPT (Perelomov, Popov, Terent'ev) 理论中的库仑修正是一致的^[36]. 此外, 在 ARM 理论中, 库仑修正与 $\mathbf{p}$ 有关, 不同的末态动量对应于外光场半周期内的不同时刻, 因此库仑修正亦与外光场半周期内的时刻有关. (9) 式的第三行为标准 Keldysh 电离理论中的指数项 $e^{-iS_V(T, t_s, \mathbf{p})}$. 为了比较 (9) 式与 PPT 的理论结果, 可以从 (9) 式出发计算多光子电离的光电子谱峰以获得与 PPT 理论结果^[37] 的直接对比,

$$w_n = \int_{E_n - \omega/2}^{E_n + \omega/2} d\mathbf{p} |a_{\mathbf{p}}(T)|^2.$$

PPT 的结果是针对无限长脉冲所得的电离概率幅, 而 (9) 式反映了亚周期的电离动力学过程, 因此也可用于研究在时刻 t 隧穿波包的结构.

对在外场峰值附近单次集中电离逸出的电子波包

$$|\Delta\Psi(T)\rangle = \int d\mathbf{p} a_{\mathbf{p}}(T) |\mathbf{p}\rangle$$

进行后向演化, 并将所得波函数 $|\Delta\Psi(t)\rangle$ 投影到平面波 $|\mathbf{p} + \mathbf{A}(t)\rangle$ 上, 可得电离概率幅

$$a_{\mathbf{p}}(t) \simeq a_g(t_s) e^{-iW_C(\mathbf{r}_s(\mathbf{p}, t))} e^{iI_p t_s} R_{\kappa l0}(\mathbf{p}) \times e^{-\frac{i}{2} \int_{t_s}^t [\mathbf{p} + \mathbf{A}(t'')]^2 dt''},$$

其中

$$W_C(\mathbf{r}_s(\mathbf{p}, t)) = \int_{t_{\kappa}}^t d\tau U\left(\int_{t_s}^{\tau} dt'' [\mathbf{p} + \mathbf{A}(t'')]\right)$$

为库仑项, 轨迹

$$\mathbf{r}_s(\mathbf{p}, t) \equiv \int_{t_s}^t [\mathbf{p} + \mathbf{A}(t'')] dt''.$$

此式对所有时间 t 均成立, 只要求 t 通过原时间积分的鞍点 $t_s = t_s(\mathbf{p})$. 注意当 $t = T$ 时, 此式等于 (9) 式中 T 很大时的电离概率幅 $a_{\mathbf{p}}(T)$. 它对连接复时间鞍点 $t_s = t_0 + i\tau_T$ 与实轴上时间点 t_0 的路径也成立, 允许分析隧穿过程中波包 $\Delta\Psi$ 是如何形成的.

另一方面, 也可对 $a_{\mathbf{p}}(t)$ 中 $\mathbf{k}$ 的积分应用稳相近似, 可得

$$a_{\mathbf{p}}(t) \simeq \int d\mathbf{r} (a_g(t_s)) \frac{R_{\kappa l0} e^{-iW_C - i\pi/4 + iI_p t_s}}{[2\pi(t - t_s)]^{3/2}} \times e^{\frac{i}{2} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}_s(\mathbf{p}, t))^2}{t - t_s}} e^{-\frac{i}{2} \int_{t_s}^t (\mathbf{p} + \mathbf{A}(t''))^2 dt''}.$$

可见 ARM 联系了亚周期电离动力学与隧穿波包的结构. 在经典禁戒区, 复时间 $t - t_s = -i\xi$ 导致高斯型波包 $e^{-[\mathbf{r} - \mathbf{r}_s(\mathbf{p}, t)]^2/2\xi}$ 以轨迹 $\mathbf{r}_s$ 为中心, 随 $(t - t_s)^{-3/2}$ 逐渐扩散. 因此, 隧穿后的动量分量都对应一个从经典禁戒区中产生并且不断扩散的高斯波包.

4 亚周期光场中的库仑效应

过去的研究中, 往往仅考虑光场幅最大时刻离开的光电子的轨迹以研究库仑效应对总电离率的影响, 这在 γ 很大时甚至也适用^[38]. 而当研究高次谐波等问题时, 场幅最大后离开母核的轨迹 (短轨迹) 也十分重要, 亚周期的强场光电离效应中的非绝热效应会对光电子谱产生一定影响^[34], 因此, 亚周期瞬时电离率的研究成为一种需要. 在 TCSEFA 方法中, 库仑势的作用在两方面得到体现, 库仑势场一方面会影响轨迹的演化, 另一方面在连带的作用量上加入了额外的库仑相互作用项. 而在 ARM 中, 库仑效应只反映在作用量 W_C 上, 适宜于描述库仑势场中发生的“软”散射. 当然, TCSEFA 本身的修正也是在直接电子电离概率幅的基础上进行的, 尽管对“硬”散射 (即 HATI 的部分) 的描述在轨迹的经典行为上符合观测结果, 但高阶项的量子概率幅尚未完善.

ARM 半经典轨迹分析可用于解释库仑势对亚周期瞬时电离率的影响. 假定 $p_{\perp} = 0$, 库仑势的贡献为 e^{-iW_C} , 其中, 轨迹始于 $t_s(p_{\parallel}) = t_0(p_{\parallel}) + i\tau_T(p_{\parallel})$, 沿该轨迹计算

$$W_C(p) = \int_{t_{\kappa}}^t d\tau U \left(\int_{t_s}^{\tau} dt'' [p_{\parallel} + A(t'')] \right),$$

积分路径可分为两段, 第一段 C_1 始自 $t_{\kappa} = t_0 + i\tau_T - i/\kappa^2$, 平行于时间虚轴下降到实轴的 t_0 点. 第二段 C_2 沿着实轴从 t_0 演化到 t . 库仑势被解析延拓到复平面上, $V_C(x) = -Q/|x|$ 被延拓为 $V_C(x + iy) = -Q/\sqrt{(x + iy)^2} = -\text{sign}(x)Q/(x + iy)$. 这里只关心对电离率有贡献的库仑修正因子的虚部. 当光场最大时, 虚部只沿第一段路径累计作用, 尽管在原则上, 两段路径对库仑修正均有贡献. 对电离概率 $|a_p(t)|^2$ 的库仑影响可表达为 $e^{2W_{C_1} + 2W_{C_2}}$, 其中,

$$W_{C_1} = \frac{Q}{\omega} \int_0^{\phi_{\kappa}} \frac{|r'_1|}{r_1'^2 + r_1''^2} d\phi,$$

$$W_{C_2} = \frac{Q}{\omega} \int_{\phi_i}^{\omega t} \text{sign}(r'_2) \frac{r_2''}{r_2'^2 + r_2''^2} d\phi',$$

其中 $\phi_{\kappa} = \omega\tau_{\kappa} = \omega(\tau_T - 1/\kappa^2)$, $\phi_{\tau} = \omega\tau_T$ 为无量纲时间变量, 积分路径的两段电子轨迹的实部 r' 与虚部 r'' 分别可求,

$$r'_1 = \alpha(F/\omega^2) |\cos \phi_i| (\cosh \phi_{\tau} - \cosh \phi),$$

$$r''_1 = \beta(F/\omega^2) |\sin \phi_i| (\sinh \phi_{\tau} - \sinh \phi + \cosh \phi_{\tau}(\phi - \phi_{\tau})),$$

$$r'_2 = (F/\omega^2) [\cos \phi - \cos \phi_i \cosh \phi_{\tau} + \sin \phi_i \cosh \phi_{\tau}(\phi - \phi_i)],$$

$$r''_2 = \beta(F/\omega^2) |\sin \phi_i| (\sinh \phi_{\tau} - \phi_{\tau} \cosh \phi_{\tau}),$$

这里, $\alpha = -\text{sign}(\cos \phi_i)$, $\beta = \text{sign}(\sin \phi_i) = \text{sign}(p_{\parallel})$. α 与电离时刻电场的正负有关, 决定了电子外逸的方向, β 则包含了电子动量方向的信息. 由 α 与 β 的组合可以发现两种图像: 一种情况, 当 $\alpha = \beta$ 时, 电子沿着负(正) z 方向以负(正)动量外逸, 这种情况下电子不再返回母核, 对应于 $\phi_i \in (-\pi/2, 0), (\pi/2, 0), \dots$ 的电离时间, 此时势垒开放. 另一情况, 当 $\alpha \neq \beta$ 时, 势垒关闭, 电离发生后电子被反方向的动量拉回母核而可能导致回碰. 在只考虑第一种直接电离的情况可直接求得 W_{C_1} 与 W_{C_2} . W_{C_1} 在一个周期内的变化很小, W_{C_2} 的亚周期动力学依赖于速度的符号 β . 对于直接电

离, $W_{C_2} < 0$ 导致电离被抑制, 该修正过程本质上是非绝热的. 当势垒变薄开放时, 可以认为电子被拉回被母核俘获. 非绝热修正 $e^{2W_{C_2}}$ 不会影响产生于光场峰值附近的电子, 但是, 在电离窗口开启附近隧穿而出的电子的电离概率会被抑制达三个量级.

5 近零能结构的复轨迹分析

5.1 隧穿电离发生后的复轨迹演化

在过去半经典轨迹分析中, 往往只将虚时间演化方法应用于隧穿过程, 隧穿后连续态的光电子动力学均以实轨迹处理. 但最近的研究发现, 隧穿后的光电子轨迹依然可以维持复值, 且其虚部具有实际的物理意义^[20], 这使连续态运动过程也能改变电离概率幅. 在此过程中, 电子可能首先被束缚势捕获为里德堡态, 而在接下来与光场的相互作用中进一步再电离. 另外, 电子波包在离开母核的过程中被库仑场减速, 导致了光电子动量分布趋向低能部分.

通过对远离母核的 EVA 波函数与母核附近使用 WKB 近似的束缚态波函数进行匹配可以为轨迹提供初始条件. 通过这种匹配获得的轨迹在进入经典禁戒区域时是实值的, 这导致了在轨迹隧穿后, 即离开经典禁戒区域, 轨迹沿实时间轴演化时, 轨迹坐标的虚部非零. 这样, ARM 理论不同于电离隧穿后只使用实值轨迹的 TCSFA 方法^[10,11]. ARM 方法允许隧穿后的轨迹依然保持复值, 这使其在实时间演化过程中也能改变轨迹的权重. 这是因为, 在数学上, 位置决定了作用量, 作用量的虚部决定了复变量振幅的变化, 而在物理上, 这对应了全经典轨迹方法中发现的动态聚焦效应^[39,40].

半经典轨迹虚部的重要性在光电子回碰母核的时候表现得最为突出. 数学上, 母核势被扩展到复平面, 当轨迹实部较小时, 解析延拓后的复平面上会存在积分路径无法直接通过的分支切割面(branch cuts), 这使得常用的标准积分路径不再可行(如 TCSFA 中, 从电离时间点直接积分到实时间轴, 再沿着实轴进行积分). 这种情况下, 为了保证路径的连续性需要发展系统性程序化的方法探索库仑作用造成的分支切割面. 研究发现, 分支切割面总是成对出现, 在一对分支切割面之间包含着一个距离原点 $\sqrt{r(t)^2}$ 的鞍点, 该鞍点是最接近时间

方程 $\mathbf{r}(t) \cdot \mathbf{v}(t) = 0$ 的解. 不论从复量子轨迹还是从 simple-man 经典轨迹的角度进行分析, 这些最接近时间解都构成具有丰富拓扑性质的结构面. 从实用计算的角度而言, 通过选择一系列合适的最近时间, 人们可以系统地选择正确的积分路径.

在此框架下, 可以研究与 NZES 相关的软回碰过程. 所谓软回碰轨迹, 指的是电子在纯光场驱动轨迹的拐点处趋近母核并受母核作用发生轻微偏折, 但不会与母核发生对碰. 回碰轨迹显然指那些已经隧穿而出的电子, 但考虑到引入隧穿后复轨迹的概念, 这允许回碰过程改变电离概率幅. 软回碰表现为不同分支切割面间的复杂相互作用, 以两组或三组最接近鞍点解彼此靠近以及分支切割面位型的拓扑变化为典型特征. 光电子在母核离子附近驻留时间更长, 在复平面上表现为奇点与鞍点相互接近, 导致了电离概率幅值的增加, 反映了实验中增强的光电子峰. 在文献[18]的分析中, 离子库仑势被假定不会改变轨迹的经典运动, 它只影响波函数的相位, 这样的假设可以大大简化分析过程. 下面, 将在纯光场驱动轨迹的基础上, 介绍软回碰过程与 NZES 的关系.

5.2 纯光场驱动下经典轨迹的软回碰

Simple-man 模型是描述隧穿电离后光电子动力学最简单的方法. 考虑单色线偏振光场, 场强为 $\mathbf{F}(t) = F \cos \omega t \hat{\mathbf{z}}$, 矢势为

$$\mathbf{A}(t) = - \int \mathbf{F}(t) dt = -(F/\omega) \sin \omega t \hat{\mathbf{z}}.$$

在 SFA 中, 电子速度 $\mathbf{v}(t) = \mathbf{p} + \mathbf{A}(t)$, 其中 $\mathbf{p}$ 为探测器处测得的正则动量. 在 $t_s = t_0 + i\tau_T$ 时刻发生电离, 外逸电子从于原点处出发, 满足鞍点方程 $\frac{1}{2}[\mathbf{p} + \mathbf{A}(t_s)]^2 + I_p = 0$. 电子的复空间轨迹为

$$\mathbf{r}_{cl}(t) = \int_{t_s}^t [\mathbf{p} + \mathbf{A}(\tau)] d\tau.$$

软回碰事件发生在激光驱动轨迹的拐点, 电子在母核附近的拐点处速度为零. 为了找到经典轨迹中的软回碰时间 t_r , 令位置与速度的实部均为零,

$$\begin{aligned} \text{Re}[z_{cl}(t_r)] &= \text{Re} \left[\int_{t_s}^{t_r} [p_z + A(\tau)] d\tau \right] = 0, \\ v_z(t_r) &= p_z + A(t_r) = 0. \end{aligned}$$

代入单色光场, 进一步表达为可数值求解的运动方程

$$z_{\text{exit}} + p_z(t_r - t_0) + \frac{F}{\omega^2} [\cos \omega t_r - \cos \omega t_0] = 0,$$

$$p_z - \frac{F}{\omega} \sin \omega t_r = 0, \quad (11)$$

其中

$$\begin{aligned} z_{\text{exit}} &= \text{Re} \left[\int_{t_s}^{t_0} [p_z + A(\tau)] d\tau \right] \\ &= \frac{F}{\omega^2} \cos(\omega t_0) (1 - \cosh \omega \tau_T) \end{aligned}$$

为隧穿出口. 因为所有的软回碰都发生在相比 U_p 能量很小的情况, 可以将轨迹以 p_z 为小量做展开(线性化). 由鞍点方程可将初始电离时间 t_s 表达为

$$\begin{aligned} t_0 + i\tau_T &= \frac{1}{\omega} \arcsin \left(\frac{\omega}{F} (p_z + i\kappa) \right) \\ &\simeq \frac{p_z}{F} \frac{1}{\sqrt{1 + \gamma^2}} + i \frac{1}{\omega} \text{arcsinh} \gamma, \end{aligned}$$

其中 Keldysh 参数 $\gamma = \omega \kappa / F$, 则

$$t_0 \simeq \frac{p_z}{F} \frac{1}{\sqrt{1 + \gamma^2}}, \quad \tau_T = \frac{1}{\omega} \text{arcsinh} \gamma.$$

代入隧穿出口并取级数展开的第一项, 得 $z_{\text{exit}} \simeq -(F/\omega^2) (\sqrt{1 + \gamma^2} - 1)$. 在隧穿极限 $\gamma \ll 1$ 下, z_{exit} 趋于 $-I_p/F$. (11) 式在线性化后近似为

$$\begin{aligned} p_z t_r + \frac{F}{\omega^2} [\cos \omega t_r - \sqrt{1 + \gamma^2}] &= 0, \\ p_z - \frac{F}{\omega} \sin \omega t_r &= 0. \quad (12) \end{aligned}$$

求解 (12) 式需要对 t_r 关于 p_z 进行线性化. 对未做近似的原系统数值求解可以发现, 每半个周期在 $\omega t_r = 2\pi$ 后都会发生一次软回碰, 因此令 $\omega t_r = (n+1)\pi + \omega \delta t_r$, 其中 $n = 1, 2, 3, \dots$, 代入 (12) 式可得 $\delta t_r \simeq (-1)^{n+1} p_z / F$, 且有 $\cos \omega t_r \simeq (-1)^{n+1}$, 因此反过来可求发生连续软回碰的轨迹的漂移动量:

$$p_z^{\text{sr}} \simeq \frac{F}{\omega} \frac{\sqrt{1 + \gamma^2} + (-1)^n}{(n+1)\pi}.$$

该式可以很好地近似 (11) 式的精确解. n 的奇偶性决定了轨迹从哪个方向回碰母核, 它赋予了轨迹不同的行为, 特别是随 γ 变化的尺度关系: 对于 n 为奇数, 隧穿极限 $\gamma \rightarrow 0$ 下,

$$p_z^{\text{sr}} \simeq \frac{F}{\omega} \frac{\gamma^2}{(n+1)2\pi} = \frac{\gamma \kappa}{(n+1)2\pi},$$

对 κ 固定的特定原子, 动能 $p^2/2 \propto \gamma^2$; 对于 n 为偶数,

$$p_z^{\text{sr}} \simeq \frac{F}{\omega} \frac{1}{(n+1)\pi} = \frac{\kappa}{\gamma(n+1)\pi},$$

动能 $p^2/2 \propto \gamma^{-2}$. 在波长为 3.1 μm , 强度为 $1 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 的外光场中, 氩原子在 n 为奇

数情况下, 最高动量 $p_z \simeq 0.02$ a.u., 对应 8 meV 的动能, 这与 NZES 的观测范围相一致.

实验上可以通过研究 NZES 光电子能量是否具有 $\gamma^2 I_p$ 的尺度关系来决定软回碰机制是否起作用. 受限于当前实验条件对低能区电子能量探测的分辨率, 同时又需要保证系统处于 $\gamma \rightarrow 0$ 的隧穿极限, 这个尺度关系对当前实验而言过于苛刻. 它暗示了使用具有高电离能的靶将有益于 NZES 的探测, 例如, 通过离子束或顺序电离制备具有四倍于氢原子电离能的 He^+ 离子, 可使用不同光强与波长, 在保持 γ 很小的同时也能令 $p_z^{\text{sr}} \sim \gamma \kappa = \kappa^2 \omega / F$ 足够大, 以使直接测量成为可能.

两类软回碰轨迹的动量比率构成了一组与系统参数无关的序列. 当 n 为偶数, 序列为 3/5, 5/7, 7/9, ...; 当 n 为奇数, 序列为 1/2, 2/3, 3/4, ... 当前实验条件还难以实现对上述序列的验证, 但这种探测一旦实现将对隧穿出口的确定产生重要意义.

在软碰撞过程中, 不论是经典轨迹的动态聚焦, 还是量子轨迹中作用量虚部的增加导致的复振幅增强, 均可用来解释产生的光电子谱峰. 奇数 n 轨迹与 U_p 间的尺度关系为人们提供了一个独立的窗口去了解 NZES 的行为, 特别是涉及有关激光场中产生里德堡态的解释^[41,42]. 如果系统中已存在里德堡态, 高激发态电子会被之后探测的牵引场再电离, 这种机制下, 光电子谱峰宽与将牵引场参数有关. 有关里德堡态的解释与这里讨论的软回碰机制很有可能将互相影响.

5.3 ARM 中的半经典复值轨迹分析

从光电离的 ARM 理论中可以自然地发现两类软回碰. 在 ARM 理论中, 可以认为母核势对光电子的主要贡献是相位的影响, 通过使用 EVA 波函数严格验证. 类似于 SFA 中, 对电离时间进行积分可以利用鞍点近似进行化简, 这提供了基于半经典轨迹的物理图像. 从 ARM 中所得的电离概率幅可以从量子轨迹的角度解释光电子行为. 在时刻 t_s 发生电离, 之后逸出的电子向探测方向演化, 直到时刻 T 结束. 电子速度为 $\mathbf{v}(t) = \mathbf{p} + \mathbf{A}(t)$, 电子轨迹位置

$$\mathbf{r}_{\text{cl}}(t) = \int_{t_s}^t [\mathbf{p} + \mathbf{A}(\tau)] d\tau. \quad (13)$$

随着轨迹演化, 根据 (9) 式, 不同来源的相位贡献不断积累: 来自电离前束缚态的 $e^{iI_p t_s}$, 来自电离后光场中运动的 $e^{-\frac{i}{2} \int_{t_s}^T [\mathbf{p} + \mathbf{A}(\tau)]^2 d\tau}$, 来自库仑相互作用的 $e^{-i \int_{t_s}^T U(\mathbf{r}_{\text{cl}}(\tau)) d\tau}$. 因为相位为复值, 它们不仅贡献纯相位, 也会对幅值造成影响并决定了隧穿的发生概率. 复平面上的积分需要选择积分路径. 原则上, 只要连接首尾两点, 任意连续路径都可以用作积分路径, 常见的做法以 TCSFA 为例, 选择平行于时间虚轴的路径从 t_s 直降到实时间轴, 再沿着实时间轴演化到 T , 这样, 两段路径分离了时间变量的实部与虚部. 积分中, 前半段路径贡献了幅值因子 $|e^{iI_p t_s} e^{-\frac{i}{2} \int_{t_s}^{t_0} [\mathbf{p} + \mathbf{A}(\tau)]^2 d\tau}|$, 它自然地包含了隧穿概率. 后半段路径再沿实轴演化, 处理起来很方便. 然而, 可以证明, 这样选择的路径在实轴段的积分上可能存在问题.

在 ARM 中使用匹配过程的主要效果是将依赖于初始位置 $\mathbf{r}$ 的光场驱动轨迹

$$\mathbf{r}_L(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \mathbf{r} + \int_t^\tau [\mathbf{p} + \mathbf{A}(\tau')] d\tau'$$

替换为 (13) 式从原点出发的轨迹 $\mathbf{r}_{\text{cl}}(t)$, 且该轨迹所关联的库仑作用相因子变为

$$\exp \left[-i \int_{t_s}^T U(\mathbf{r}_{\text{cl}}(\tau)) d\tau \right].$$

新的库仑修正相因子中包含的时间积分是对原 EVA 库仑修正相因子

$$\exp \left[i \int_T^t U(\mathbf{r}_L(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{p}, t)) d\tau \right]$$

中实值积分的解析延拓, 它唯一地确定了用于库仑修正的轨迹, 初始条件由匹配过程所决定.

ARM 与 TCSFA 中对轨迹的使用有几点不同. ARM 中, 轨迹 $\mathbf{r}_{\text{cl}}(t)$ 只由纯光场作用下的运动方程 $\ddot{\mathbf{r}}_{\text{cl}}(t) = -\mathbf{F}(t)$ 决定, 这不同于 TCSFA 方法中轨迹满足复合场下 (同时包含激光场与库仑势场) 相互作用的运动方程. 这种选择的合理性是, EVA 波函数里出现 $\mathbf{r}_{\text{cl}}$, 若想包含母核势对轨迹的作用, 在 EVA 波函数的层面上处理应是理想的选择. ARM 初始条件的选择不同于 TCSFA 中的初始条件. ARM 中, 轨迹的初始条件是从第一性原理中获得的, 它要求轨迹在隧穿入口处为实, 而不限定轨迹在出口处的性质; 而在 TCSFA 中, 假定轨迹在隧穿出口处为实. 但不论选取何种方法, 在复空间中计算包含全相互作用的运动方程的半经典轨迹都存在很多困难, 其中, 困难之一就在于复时间平面上会出现分支切割面.

ARM 方法允许使用基于轨迹的方法来描述母核势对光电子的作用. 沿着电子的复轨迹对势能做积分, 可以得到正确的修正因子

$$\exp \left[i \int_T^t U[\mathbf{r}_L(\tau; \mathbf{r}, \mathbf{p}, t)] d\tau \right].$$

在时刻 t_κ 处, 轨迹始于实位置 $\mathbf{r}_{cl}(t_\kappa) \simeq -\hat{\mathbf{z}}/\kappa$, 但此后轨迹演化进入复数域, 积分函数、积分时间与轨迹位置均为复值. 位置的虚部有两个来源, 其一源自横向动量 $p_\perp$, 因为实值的 $p_\perp$ 会在时间 $t_s = t_0 + i\tau_T$ 与 $t = t_0$ 间积累纯虚的横向位移 $i\mathbf{p}_\perp \tau_T$. 另外, 纵向位置也会通过对矢势的积分产生虚分量.

在电子向探测器演化的方向上, 当积分时间为纯实时, (13) 式中的积分函数总为实值, 沿实轴演化过程中, 虚位置将不变, 在 T 时刻前电子被探测到前它将一直维持存在, 但那时位置变量在演化过程中积累的实部将远超虚部. 但在回碰过程中, 位置变量的实部会减小, 虚部将居于主导, 这在计算母核势时成为一个需要讨论的问题. 对于库仑势, 最简单的形式可写为复平面上的解析表达式 $U(\mathbf{r}) = -1/\sqrt{\mathbf{r}^2} = -1/\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. 对于使用了平方根的复值库仑势, 复平面上沿着 $\mathbf{r}^2 \in (-\infty, 0)$ 方向会存在无法忽略的分支切割面. 电子回碰时会遇到这些分支切割面, 同时, $\mathbf{r}^2$ 的虚部会远大于实部. 实际上, 复值位置的平方可被分解为 $\mathbf{r}^2 = \text{Re}\mathbf{r}^2 - \text{Im}\mathbf{r}^2 + 2i\text{Re}\mathbf{r} \cdot \text{Im}\mathbf{r}$. 在 $\text{Im}\mathbf{r}^2 > \text{Re}\mathbf{r}^2$ 的条件下, 当 $\text{Re}\mathbf{r} \cdot \text{Im}\mathbf{r} \rightarrow 0$ 时 (即符号改变处), 轨迹到达分支切割面, 导致 $\sqrt{\mathbf{r}^2}$ 在复平面上随 $\mathbf{r}$ 的变化不连续, 因为虚部 $\text{Im}\sqrt{\mathbf{r}^2}$ 的符号会发生突然改变. 如果积分路径不加选择地直接经过该分支切割面, 以 t 为变量的库仑势作用量积分不再是解析函数, 这样就无法将实值积分式 (4) 转化为复平面上通过鞍点 t_s 的曲线积分, 计算结果也将失去意义. 为了解决这个问题, 需要将整个势能看作是复变量时间 t 的单值解析函数, $U[\mathbf{r}_{cl}(t)] = -1/\sqrt{\mathbf{r}_{cl}(t)^2}$, 通过共形映射 $t \mapsto \mathbf{r}_{cl}(t)^2$ 可以将 $U(\mathbf{r})$ 的分支切割面嵌入到时间复平面中. 当电子回到母核附近时, 一般的积分路径可能会经过分支切割面, 为了保证库仑修正相因子的解析性, 人们须将积分路径移离实轴, 避开分支切割面, 使积分函数再次解析连续. 这个过程也会同时改变复值轨迹的路径 $\mathbf{r}_{cl}(t)$, 其主要效果是最小化碰撞时刻的 $\text{Im}\mathbf{r}_{cl}(t)$. 通常, 所选时间路径

与空间坐标的关系复杂, 末态动量 $\mathbf{p}$ 对分支切割面的结构以及 $U(\mathbf{r}_{cl}(t))$ also 具有很强的影响, 特别是在软回碰过程中有时会十分敏感, 因此也会决定如何选择复平面上的路径.

5.4 路径选择-最接近时间

因为横亘在实轴上的分支切割面会阻碍标准积分路径的使用, 为了避免这种情况, 选择的积分路径需要通过分支切割面缝隙间的避障门 (slalom gate). 计算光电子动量谱时会涉及大量不同的动量参数, 因此, 发展一套系统的程序方法使之能够按动量自动选择合适的积分路径是十分必要的.

通过研究两个分支切割面之间空隙的性质, 可以发现选择合适积分路径的方法. 已知每个分支切割面都是 $\text{Re}\sqrt{\mathbf{r}_{cl}(t)^2} = 0$ 的等高线, 如果分支切割面能够组成避障门的构型, 切割面之间总会出现鞍点, 它是自动选择避开分支切割面的重要对象. 能在复平面上横跨左右的路径, 离原点的实值距离 $\text{Re}\left[\sqrt{\mathbf{r}_{cl}(t)^2}\right]$ 会先减少, 到达其最小值后再增大. 对通过分支切割面的路径, 最小值为零, 这伴随着虚部符号的变化, 造成复变函数的不连续性. 而对于避开分支切割面的路径, 当它通过鞍点时可以获得最大化的最小值. 因此, 可以称鞍点为“最接近时间”, 定义为 t_{CA} . 准确地说, 通过 $t = t_{CA}$ 的路径使得得到原点的距离 $\text{Re}\sqrt{\mathbf{r}_{cl}(t)^2}$ 最小时的实部具有最大值. 换句话说, 它可以令电子在最接近母核时的距离达到最大. 类似地, 当沿着这些所选路径计算库仑势时, 可以在保证路径不遭遇分支切割面的情况下, 最小化 $1/\sqrt{\mathbf{r}_{cl}(t)^2}$ 实部与绝对值的最大值, 并令库仑相互作用尽可能地保证有界. 为了找出鞍点, 需求出令 $\partial_t \sqrt{\mathbf{r}_{cl}(t)^2} \stackrel{!}{=} 0$ 的解, 进一步知需满足 $\partial_t [\mathbf{r}_{cl}(t)^2] = 0$, 则鞍点条件为

$$\mathbf{r}_{cl}(t_{CA}) \cdot \mathbf{v}(t_{CA}) = 0. \quad (14)$$

描述该式的物理图像是, 电子回到母核附近, 当速度与位置矢量垂直时, 电子与母核距离最近. 不论是经典轨迹还是复值半经典轨迹描述, 该式的解均表现出丰富的几何结构, 而当软回碰发生时, 相应时间与动量关系即为几何结构中的临界点.

5.5 经典最接近时间解的特征

值得说明的是, (14) 式的解未必全都是最接近时间. 不难想象, 不论电子离母核有多远, 经典轨

迹中拐点也是 (14) 式的解, 因为它们也是 r^2 的极值点. 为了用最接近时间避免分支切割面, 需要区别避障门中心点 t_{CA} 与其他解. 某些情况下容易区分这些解, 如当 $p_{\perp} = 0$ 时, 其解可分成满足 $v_z(t) = 0$ 的拐点与满足 $z_{cl}(t) = 0$ 的回碰点. 进一步, 通过计算 $d^2[r_{cl}(t)^2]/dt^2$ 的正负号, 可以根据 $r_{cl}(t)^2$ 的最小值与最大值对拐点进行归类. 这种情况下, 软回碰发生在两条曲线的交点, 即同时满足 $v_z(t) = 0$ 与 $z_{cl}(t) = 0$ 的时间. 随着动量变化, 拐点的个数可能发生变化, (14) 式的根能够在拐点曲线的极值点处合并, 在这些点上, 纵向动量大于振荡幅度 F/ω , 速度 $v_z(t) = p_z - \frac{F}{\omega} \sin(\omega t)$ 将不再改变符号. 当 $p_x \neq 0$ 时, 最接近时间的解形成了单个结构面, 它包含了一系列有界的叶瓣. 叶瓣在软回碰点处彼此相连, 局域上看起来果核. 这样, 就有可能通过结构面上的路径连续地连接任何两个根. 在一般情况下, 没有简单的办法可以直接区分拐点与最接近时间点.

但是, 还是可以鉴别出向外的拐点, 因为 $r_{cl}(t)^2$ 在这类拐点处具有局域最大值. 更具体地说, 任何常动量的水平线需要通过一个最大值点进入表面, 而从一个最小值点离开表面, 因为任何轨迹都会在最大值与最小值间相互交替. 这样, 表面点的最大值一侧指向负 t , 最小值一侧指向正 t . 在结构面上两部分的边界处, 最大与最小合并消失.

5.6 量子最接近时间解的特征

因为具有额外的虚时间维度, 量子最接近时间解具有更丰富的几何结构. 解的数量得到增加: 在经典情况下, 两个实值解可以合并消失, 但在量子情况下, 复值解依然存在, 它会移动到含有虚时间分量的区域. 总的来说, 在经典解存在的情况下, 量子解和经典解相近. 以经典解的结构面为参考, 当趋近于瓣的尾端时, 对应的量子解会在实轴靠近彼此, 在保持实部相对常量的同时, 虚部向正负方向发散. 若将量子解投影到实时间, 结果就是一对彼此靠近的表面, 紧紧跟随着经典解结构面上最大值面与最小值面的部分, 当到达边界时, 发散为大致平行的渐进面.

前几个少量的最接近时间的解平滑地依赖于动量, 相对容易处理. 最重要的 t_{CA} 最接近事件发生在软回碰附近, 它具有非常复杂的动量依赖关系. 在量子区域, 软碰撞代表了三种不同的最接近

时间解之间的相互作用. 不同于经典时间, 这些根不会合并, 相反, 其中两个在三路碰撞规避之后移动进虚时间. 多个鞍点间的接近度表明了软碰撞时, 电子在离子附近驻留更久.

更有趣的是, 该三条路径的碰撞标记了与软碰撞有关的分支切割面构型中重要的拓扑变化. 外鞍点 $t_{CA}^{(1)}$ 与 $t_{CA}^{(3)}$ 具有一对与之相关的分支切割面, 它们位于虚时间面中. 不过, 这些结构会在 p_z 通过软回碰动量 p_z^{sr} 时发生改变. 如图 1(a), 对于 $p_z < p_z^{sr}$, 分支切割面未跨越实时间轴而转回虚时间域, 当轨迹动量较低时, 轨迹碰撞不特别剧烈, 相关的分支切割面没有强迫改变路径. 但当 $p_z = p_z^{sr}$ 时, 分支切割面接触并发生重连, 当 $p_z > p_z^{sr}$, 如图 1(b), 拓扑结构变化, 此时轨迹经过母核, 相关的分支切割面跨越实轴, 迫使积分路径改变以通过分支切割面构成的避障门.

这个过程对电离概率幅的计算有重要的影响, 因为积分函数刚好在它最大的时候发生剧烈变化. 在此区域里, 选择错误的路径会影响积分函数中具有最大贡献的部分, 进而影响积分本身. 出乎意料的是, 一旦迫使路径穿过门点 t_{CA} , 对于刚好高于 p_z^{sr} 的 p_z , 它们的贡献会抑制电离概率.

为了澄清电离抑制发生的过程, 考虑图 1(a) 中构型的积分 $\int U[r_{cl}(t)]dt$. 在中心鞍点处 $t_{CA}^{(2)}$, $\sqrt{r_{cl}(t)^2}$ 有最小值, $1/\sqrt{r_{cl}(t)^2}$ 具有最大值, 是整个积分的主要贡献. 此时, 接近距离 $r_* = \sqrt{r_{cl}(t_{CA}^{(2)})^2}$ 的主要成分是一个适中的正值虚部, 意味着 $U_* = -1/r_*$ 值较大且为虚值, 修正因子 $e^{-i \int U dt}$ 的幅值因此较大.

另一方面, 图 1(b) 中积分主要是由避障门最接近时间决定的, $r'_* = \sqrt{r_{cl}(t_{CA}^{(1)})^2}$ 几乎为实值, 其值比 r_* 的小很多, 相应的势 $U'_* = -1/r'_*$ 接近一个很大的负值实数, 因此 $-iU'_*$ 沿着 $+i$ 方向. 但是, 线元 dt 需要带着一个正值虚部沿上坡行进以强调鞍点的贡献, 这使得 $-i \int U[r_{cl}(t)]dt$ 具有一个很大的负值实分量, 进而抑制库仑修正因子 $e^{-i \int U dt}$.

这个效应在光电子谱中呈现为刚好在软回碰下出现的高峰伴随着一个深而窄的沟道. 实验上, 沟道极有可能被附近的数据平均掉, 但峰应当会被观测到. 此外, 这些效应反映了基于经典轨迹方法所得布居的重排, 动态聚焦产生的峰代表了从其他渐进动量获取的轨迹, 相应的幅值会缩减.

5.7 积分路径的设计

复时间平面上, 分支切割面的拓扑变化除了会影响电离概率幅, 也会影响积分路径的设计. 利用最接近时间可以找到避障门来避免分支切割面, 但

不是所有的 t_{CA} 都是需要经过的点, 一些避障门会将积分路径最终引入本无需跨越的死胡同. 通过算法可以获得适当的路径, 对于外鞍点, 在软回碰时, 连接分支切割面间的拓扑变化总是伴随着 $v(t)^2$ 实部的变化.

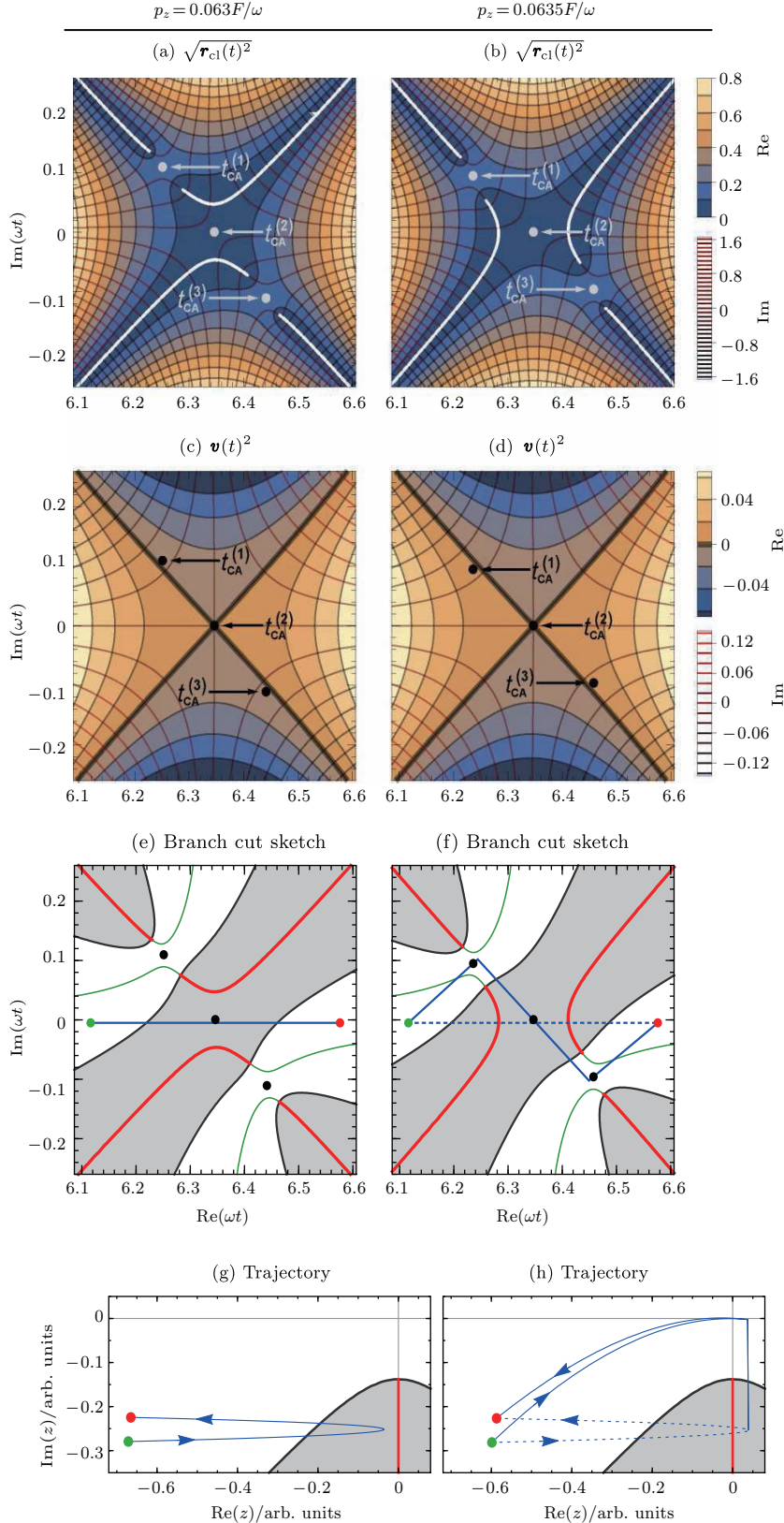


图1 摘自文献 [18] 中图 12, 在软回碰的过程中, 量子最接近时间表现为三路接近 (a) 与 (b) 显示, 当接近发生时, 与这些鞍点有关的分支切割面会发生重连并改变拓扑结构; (c) 与 (d) 显示, 当拓扑发生改变时, 外鞍点 $t_{CA}^{(1)}$ 与 $t_{CA}^{(3)}$ 出现在经典禁戒区域, 动能的实部 $\text{Re}[\frac{1}{2}v(t)^2]$ 会改变符号, 拓扑结构变化后, 回碰的光电子无需通过隧穿便可到达外鞍点, 这时积分路径应当经过它们; (e) 与 (f) 展示了相关的分支切割面以及对不同拓扑结构所选择合适的积分路径; (g) 与 (h) 展示了上述所选积分路径所对应的复值轨迹沿着 z 方向的演化. 如果光电子在演化中没有到达母核, 轨迹不存在特殊变化. 但是, 对于较高的动量, 若轨迹经过原点 (h), 继续沿用 (f) 中虚线的积分路径将会导致遭遇分支切割面, 因此需要通过改变积分路径来避开切割面

Fig. 1. Adapted from Fig. 12 in Ref. [18]. The closest approach times perform a three-way close approach during a soft recollision. (a) and (b) show the branch cuts of these saddle points will reconnect and the topologies will change, at which point the outer saddle points $t_{CA}^{(1)}$ and $t_{CA}^{(3)}$ emerge from the classically forbidden region and the kinetic energy $\text{Re}[\frac{1}{2}v(t)^2]$ changes sign, as shown in (c) and (d). After the change, the outer saddle points can be reached without tunneling and the integration contour should pass them. Panels (e) and (f) illustrate the relevant branch cuts along with the proper integration contour for each topology, the corresponding trajectories moving along z -axis are shown in (g) and (h). No change occurs if the electron does not return to the core as shown in (g), however, the trajectory passes the origin and would cross the associated branch cut if taken along the dashed integration contour of (f), so the contour must be deformed to avoid it, as shown by the solid line.

在图 1(b) 的闭合拓扑结构中, 在鞍点 $t_{\text{CA}}^{(1)}$ 与 $t_{\text{CA}}^{(3)}$ 处, 动能实部 $\text{Re}[\mathbf{v}(t_{\text{CA}})^2]$ 为正值, 路径通过了这些最接近时间点. 对比之下, 在图 1(a) 的开放拓扑中, $\text{Re}[\mathbf{v}(t_{\text{CA}}^{(1)})^2]$ 与 $\text{Re}[\mathbf{v}(t_{\text{CA}}^{(3)})^2]$ 均为负值, 路径丢弃了这两个鞍点. 这个选择标准的物理意义在于, 经典禁戒区是复平面上动能值或其实部为负的区域. 如图 1(a) 所示, 被舍弃的鞍点是那些在回碰过程中, 对应于轨迹向母核方向行进需要穿越势垒的鞍点.

根据这个标准, 产生积分路径所选取的最接近时间只要满足: 1) 发生在电离以后; 2) 虚部合理地有界; 3) 动能为正值. 然后将这些满足条件的最接近时间按 $\text{Re}[t_{\text{CA}}]$ 增加的次序排列, 就可以构成复时间平面上正确的积分路径.

5.8 库仑修正电离率

引入库仑修正因子相比标准 SFA 能将光电离率提高 2 到 3 个量级, 这主要是在经典禁戒区内的库仑相互作用导致的, 这种增强效应在经典软碰撞 p_z^{sr} 处具有很强的变化. 导致了在 p_z^{sr} 一侧动量分布会高度增强, 而在另一侧则出现一个深而窄的沟道. 在母核附近出现多个鞍点, 标志着电子在母核附近驻留得更久, 也意味着库仑修正需要足够大,

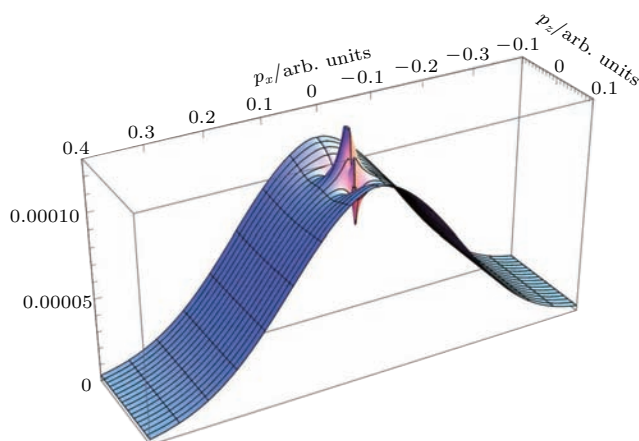


图 2 摘自文献 [18] 中图 14 使用 ARM 方法计算的氩原子在长波长光场情况下 (波长 $\lambda = 3.1 \mu\text{m}$, $\gamma = 0.31$) 的 NZES 结构, 随着在母核附近驻留的时间的增加电离增强会形成电离率上的尖峰, 但随后会突然从增强变为抑制

Fig. 2. Adapted from Fig. 14 in Ref. [18]. The subcycle ionization yield calculated by ARM method shows the NZES in Argon for long-wavelength fields ($\lambda = 3.1 \mu\text{m}$, $\gamma = 0.31$). The ionization yield may get enhanced with the increasing time around the core when $p_z < p_z^{\text{sr}}$. However, the enhancement turns into a strong suppression for $p_z > p_z^{\text{sr}}$.

但是, 库仑修正的效果取决于发生软回碰时拓扑变化的细节. 如图 2 所示, 在发生软回碰的附近, 当横向动量很小时, 光电子动量谱上会出现一个锐利的脊, 脊终止于 p_z^{sr} . 这个脊类似于在长波长情况下, 动量谱上小横向动量附近观测到的尖峰 (cusps) [14]. 当 $p_{\perp}$ 改变时, 尖峰会突然从高斯分布中突升而出. 在软回碰的另一侧, $p_z > p_z^{\text{sr}}$, 电离行为刚好相反, 电离增强变成电离抑制, 增强与抑制间的相互作用在其临近处形成复杂的结构.

在实验中很难完全分辨光电子动量分布结构中的细节, 但是现有条件应该能够观测到电离增强的突起结构. 此外, 通过图 2 中拓扑改变过程中电离信号发生从增强到抑制的快速变化, 比较其与波长的尺度关系, 可以建立光电离率与经典软回碰过程的直接联系, 也可设计实验探索两种低能结构尺度关系的不同.

6 总 结

ARM 方法从第一性原理的角度, 有效地对电子-光场、电子-母核势相互作用随作用范围的不同进行分区, 在半经典近似的基础上提供了包含库仑效应的强场电离的量子轨迹图像, 并将库仑势的效果简化为一个额外的作用量. 对于与低能区光电子谱有关的软回碰问题, 半经典轨迹可假定为从一个实值位置出发, 在穿越经典禁戒区域的同时获得虚分量的电子轨迹. 该虚分量在回碰点附近占主导地位, 会极大地影响复平面上的库仑相互作用 $U[\mathbf{r}_{\text{cl}}(t)] \cdot U[\mathbf{r}_{\text{cl}}(t)]$ 本应为解析函数, 但在解析延拓 $U(\mathbf{r}) = -1/\sqrt{\mathbf{r}^2}$ 时会产生分支切割面, 导致函数不连续, 积分时需谨慎, 可以通过精心设计的时间路径来避免这些分支切割面. 避免分支切割面的一个关键方法就是最接近时间 t_{CA} , 它满足复值方程 $\mathbf{r}_{\text{cl}}(t_{\text{CA}}) \cdot \mathbf{v}(t_{\text{CA}}) = 0$, t_{CA} 总会在每个分支切割面所组成避障门的中间出现. 不论是在复数域还是实数域 (simple-man 模型), 这些最接近时间本身就具有丰富几何结构. 此外, 与低能结构有关的软回碰信息也被嵌入在这些几何结构中.

使用最接近时间发展的系统性算法允许对所有动量都能够程序化地选择正确的积分路径. 特别是, 该公式除了引入了一系列能够产生已知低能结构的轨迹, 还预测了另一个系列的具有更低动量的轨迹. 这些轨迹不会出现在不包含隧穿入口的理论

中, 这解释了为何这些低动量轨迹迄今仍被忽视, 它们可能对 NZES 有贡献。

该方法为发展电离理论的全第一性原理提供了一个参考, 指出了可能遇到的困难及相应的解决方案. 在当前计算中, 轨迹本身仅考虑了激光驱动下的轨迹而尚未包含库仑势的作用, 但是可以预期, 试图包含库仑相互作用的的第一性原理也会遇到与 ARM 理论同样的虚位置性质, 且全轨迹计算会更加困难. 特别是, 类似的理论会像 ARM 理论一样, 遇到复时间平面上同样的分支切割面。

此外, 近零能结构形成机制的研究能够帮助设计实验方案. 特别是, 奇数阶软回碰轨迹的能量尺度比例为 γI_p^2 , 这表明, 针对更硬的目标, 如 He^+ , 相关实验会澄清这些结构的根源. 此外, 基于轨迹的解释为通过直接改变轨迹形状的进行探测的方案开放了大门. 这包括改变脉宽、椭圆偏振光等, 它提供了一个可用于理解低能光电子在隧穿区域半经典动力学行为的系统工具, 可为其他尚未发现的低能电离现象提供预言。

参考文献

- [1] Blaga C I, Catoire F, Colosimo P, Paulus G G, Muller H G, Agostini P, DiMauro L F 2008 *Nat. Phys.* **5** 335
- [2] 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
- [3] Liu C, Hatsagortsyan K Z 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 113003
- [4] Liu C, Hatsagortsyan K Z 2011 *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **44** 095402
- [5] Liu C, Hatsagortsyan K Z 2012 *Phys. Rev. A* **85** 023413
- [6] Paulus G G, Becker W, Nicklich W, Walther H 1994 *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **27** L703
- [7] Becker W, Grasbon F, Kopold R, Milošević D, Paulus G, Walther H 2002 *In Advances in Atomic, Molecular, and Optical Physics* (edited by Walther B B A H) (Vol. 48) (Waltham: Academic Press) pp35–98
- [8] Milosevic D B, Ehloltzky F 1998 *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **31** 4149
- [9] Popruzhenko S, Bauer D 2008 *J. Mod. Opt.* **55** 2573
- [10] Yan T M, Popruzhenko S V, Vrakking M J J, Bauer D 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 253002
- [11] Yan T M, Bauer D 2012 *Phys. Rev. A* **86** 053403
- [12] Wu C Y, Yang Y D, Liu Y Q, Gong Q H, Wu M, Liu X, Hao X L, Li W D, He X T, Chen J 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 043001
- [13] Dura J, Camus N, Thai A, Britz A, Hemmer M, Baudisch M, Senftleben A, Schröter C D, Ullrich J, Moshhammer R, Biegert J 2013 *Sci. Reports* **3** 2675
- [14] Pullen M G, Dura J, Wolter B, Baudisch M, Hemmer M, Camus N, Arne Senftleben, Schroeter C D, Moshhammer R, Ullrich J, Biegert J 2014 *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **47** 204010
- [15] Wolter B, Lemell C, Baudisch M, Pullen M G, Tong X M, Hemmer M, Senftleben A, Schröter C D, Ullrich J, Moshhammer R, Biegert J, Burgdörfer J 2014 *Phys. Rev. A* **90** 063424
- [16] Torlina L, Smirnova O 2012 *Phys. Rev. A* **86** 043408
- [17] Torlina L, Ivanov M, Walters Z B, Smirnova O 2012 *Phys. Rev. A* **86** 043409
- [18] Pisanty E, Ivanov M 2016 *Phys. Rev. A* **93** 043408
- [19] Kaushal J, Smirnova O 2013 *Phys. Rev. A* **88** 013421
- [20] Torlina L, Kaushal J, Smirnova O 2013 *Phys. Rev. A* **88** 053403
- [21] Smirnova O, Spanner M, Ivanov M 2006 *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **39** S307
- [22] Walters Z B, Smirnova O 2010 *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **43** 161002
- [23] Caillat J, Zanghellini J, Kitzler M, Koch O, Kreuzer W, Scrinzi A 2005 *Phys. Rev. A* **71** 012712
- [24] Scrinzi A 2010 *Phys. Rev. A* **81** 053845
- [25] Tao L, Scrinzi A 2012 *New J. Phys.* **14** 013021
- [26] Kuchiev M Y 1987 *JETP Lett.* **45** 404
- [27] Corkum P B 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 1994
- [28] Yudin G L, Ivanov M Y 2001 *Phys. Rev. A* **63** 033404
- [29] Chen Z, Le A T, Morishita T, Lin C D 2009 *Phys. Rev. A* **79** 033409
- [30] Le A T, Lucchese R R, Tonzani S, Morishita T, Lin C D 2009 *Phys. Rev. A* **80** 013401
- [31] Smirnova O, Mouritzen A S, Patchkovskii S, Ivanov M Y 2007 *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **40** F197
- [32] Brabec T, Ivanov M Y, Corkum P B 1996 *Phys. Rev. A* **54** R2551
- [33] Huismans Y, Rouzée A, Gijsbertsen A, Jungmann J H, Smolkowska A S, Logman P S W M, Lépine F, Cauchy C, Zamith S, Marchenko T, Bakker J M, Berden G, Redlich B, van der Meer A F G, Muller H G, Vermin W, Schafer K J, Spanner M, Ivanov M Y, Smirnova O, D Bauer, Popruzhenko S V, Vrakking M J J 2011 *Science* **331** 61
- [34] Song X, Lin C, Sheng Z, Liu P, Chen Z, Yang W, Hu S, Lin C D, Chen J 2016 *Sci. Reports* **6** 28392
- [35] Smirnova O, Spanner M, Ivanov M 2008 *Phys. Rev. A* **77** 033407
- [36] Popov V S 1999 *Physics-Uspekhi* **42** 733
- [37] Perelomov A M, Popov V S, Terent'ev M V 1966 *JETP* **23** 924
- [38] Popruzhenko S V, Mur V D, Popov V S, Bauer D 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 193003
- [39] Kästner A, Saalman U, Rost J M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 033201
- [40] Kästner A, Saalman U, Rost J M 2012 *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics* **45** 074011
- [41] Nubbemeyer T, Gorling K, Saenz A, Eichmann U, Sandner W 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 233001
- [42] Landsman A S, Pfeiffer A N, Hofmann C, Smolarski M, Cirelli C, Keller U 2013 *New J. Phys.* **15** 013001

SPECIAL TOPIC — Atomic and molecular processes driven by ultrafast intense laser fields

Progress in study of low-energy photoelectron in ultra-fast strong fields-analytical R-matrix theory based semiclassical trajectory method*

Huang Wen-Xiao¹⁾²⁾ Zhang Yi-Zhu¹⁾ Yan Tian-Min^{1)†} Jiang Yu-Hai^{1)2)3)‡}

1) (Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201210, China)

2) (University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

3) (ShanghaiTech University, Shanghai 201210, China)

(Received 9 October 2016; revised manuscript received 1 November 2016)

Abstract

The semi-classical method based on the recently developed analytical R-matrix theory is reviewed in this work. The method is described with the application to ultra-fast strong-field direct ionization of atoms with one active electron in a linearly polarized field [Torlina L, Smirnova O 2012 *Phys. Rev. A* **86** 043408]. The analytical R-matrix theory separates the space into inner and outer regions, naturally allowing the possibility of an analytical or semi-analytical description of wave function in the outer region, which can be approximated by Eikonal-Volkov solutions while the inner region provides well-defined boundary conditions. Applying the stationary phase method, the calculation of the ionization amplitude is cast into a superposition of components from trajectories and their associated phase factors. The shape of the tunneling wave packets associated with different instants of ionization is presented. It shows the exponential cost of deviating from the optimal tunneling trajectory renders the tunneling wave packet a Gaussian shape surrounding the semi-classical trajectory. The intrinsically non-adiabatic corrections to the sub-cycle ionization amplitude in the presence of both the Coulomb potential and the laser field is shown to have different influences on the probability of ionization. As a specific study case, soft recollisions of the released electron near the ionic core is investigated by using pure light-driven trajectories with Coulomb-corrected phase factor [Pisanty E, Ivanov M 2016 *Phys. Rev. A* **93** 043408]. Incorporating the Coulomb potential, it is found problematic to use the conventional integration contour as chosen in other methods with trajectory-based Coulomb corrections, because the integration contour may run into the Coulomb-induced branch cuts and hence the analyticity of the integrand fails. In order to overcome the problem, the evolution time of the post-tunneling electron is extended into the complex domain which allows a trajectory to have an imaginary component. As the soft recollision occurs, the calculation of the ionization amplitude requires navigating the branch cuts cautiously. The navigating scheme is found based on closest-approach times which are the roots of closest-approach times equations. The appropriately selected closest-approach times that always present in the middle of branch-cut gate may serve to circumvent these branch cuts. The distribution of the closest-approach times presents rich geometrical structures in both the classical and quantum domains, and intriguing features of complex trajectories emerge as the electron returns near the core. Soft recollisions responsible for the low-energy structures are embedded in the geometry, and the underlying emergence of near-zero energy structures is discussed with the prediction of possible observations in experiments.

Keywords: above-threshold ionization, semiclassical theory, analytical R-matrix method, complex time method

PACS: 32.80.Rm, 42.50.Hz, 33.80.Wz

DOI: 10.7498/aps.65.223204

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2013CB922200), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11420101003, 11274232, 11604347, 61675213, 91636105), and the Shanghai Sailing Program, China (Grant No. 16YF1412600).

† Corresponding author. E-mail: yantm@sari.ac.cn

‡ Corresponding author. E-mail: jiangyh@sari.ac.cn