

飞秒强激光场中分子双电离的半经典动力学模拟*

刘杰^{1,2,†}

(1 北京应用物理与计算数学研究所 北京 100088)

(2 北京大学应用物理与技术研究中心 北京 100871)

摘要 文章介绍了超短强激光场中原子、分子双电离的研究现状,提出了能够有效处理双电离过程的半经典模型,成功地重现了双电离率随激光强度变化的实验数据,同时预言了分子取向对双电离率的重要影响.文章还通过分析典型的双电离轨道的演化,给出了理解双电离复杂动力学过程的直观物理图像.

关键词 强场物理,原子分子双电离,半经典模型

Semi-classical dynamics of molecular double ionization in a femto-second intense laser field

LIU Jie^{1,2,†}

(1 Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

(2 Beijing University, Center for Applied Physics and Technology, Beijing 100871, China)

Abstract A brief introduction to the hot topic of atomic-molecular double ionization irradiated by an ultra-short intense laser field is presented. A semi-classical model is proposed to account for the complex dynamics of molecular double ionization. With this model, we reproduce the experimental data over a wide range of laser intensities and reveal the significant influence of molecular alignment on double ionization yield. Back analysis on the double-ionization trajectories provides an intuitive way towards understanding the complex dynamics involved in molecular double ionization.

Keywords strong-field physics, atomic-molecular double ionization, semi-classical model

随着激光技术的迅速发展,目前实验室已经能够获取强度超过 $1 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 、有效脉宽小于 10fs ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$) 的超短超强的激光脉冲.这种在实验室中创造的极端物理条件,目前自然界还只有在核爆中心、恒星内部、或是黑洞边缘才能找到.人们将强激光场作用到各种形态的物质上,观测到了多光子电离(MPI)、阈上电离(ATI)、高次谐波(HHG)和非顺序双电离(NSDI)等等一系列有趣而奇异的现象^[1].这些现象的发现将我们对光与原子分子相互作用的认识带到一个全新的领域:这里涉及许多非微扰、相对论强非线性占了主导地位并且时间分辨达到亚阿秒的复杂动力学问题.由于传统的量子微扰理论完全失效甚至不能定性地解释实验,因此亟待发展能够处理超快超强物理问题的非微扰理论方法和模型.这方面的研究,由于其理论上的挑战性以及在激光聚变、阿秒光物理、光控化学反应及高能天体物理等领域的广泛应用,因此受到越来越多的实验和理论物理学家的关注,成为国内外研究的前沿

热点问题.

在所有这些观测的新奇现象中,双电离问题的物理更加丰富,动力学过程更加复杂.这是由于双电离不仅仅涉及超强超快物理问题,而且它还涉及多体电子关联.与众多的实验数据对比,相关的理论更加匮乏.一方面,面对这些崭新的强场物理现象,由于激光电场的峰值强度已经达到甚至超过电子与核之间的库仑相互作用,传统的微扰理论已经无能为力,因此需要建立和发展非微扰理论来研究和分析这些现象.另一方面,上世纪90年代初,实验惊奇地观测到比理论预言(单电子近似)高出成千上万倍的双电离率事件,使得人们意识到电子关联在强场物理中发挥着不容忽视的作用.然而,正如其他强关

* 中国工程物理研究院重大项目(批准号 2006Z0202),国家重点基础研究发展计划(批准号 2006CB806000),国家自然科学基金(批准号 10725521)资助项目

2007-09-10 收到

† Email liu_jie@iapcm.ac.cn

联系统一样,一旦计入多体电子相互作用以后,双电离过程将无法用量子计算精确求解.因为在数值计算过程当中,仅仅存储系统波函数就需要 10^{18} 字节甚至更多的空间.如此巨大的内存需求,足以让所有高性能计算机望洋兴叹.为了更好地理解双电离的物理过程,人们开始寻找切实可行的近似理论.

作为初步的理论探索,我们小组在过去几年里系统地研究了强激光场中原子的双电离过程,建立了隧穿区的半经典再散射模型,并成功地应用于解释光电子动量关联、能谱分布、角分布等相关实验结果^[2].在这些工作的基础上,最近,课题组又深入研究了强激光场中分子双电离的微观机制,提出了能够用于描述不同实验参数区间(包括隧穿区和越垒区)的统一模型,预言了分子取向对双电离生成率的影响^[3].

半经典模型的核心思想是,在外部电子发生量子隧穿之后,用大量电子对的经典运动来近似模拟量子波包的扩散和碰撞等动力学过程.考虑到隧穿之后的连续态电子在强激光场中的抖动速度比较大,德布罗意波相对较短,粒子性明显强于波动性,因此电子的动力学行为可以很好地用牛顿方程来描述.我们所需重点考虑的是如何给出更加合理的初始分布,包含初始量子态及隧穿的更多信息,从而利用蒙特卡罗方法进行电子对抽样,并对经典轨道进行动力学计算和统计.由于连续态时经典量子对应的有效性及初始电子态的准确给出,这一方案在过去的几年里已经被一次又一次地证明是行之有效的.

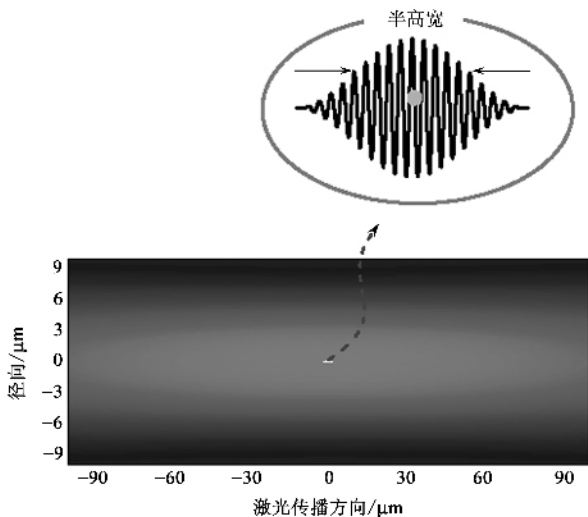


图1 高斯光束的光强分布和激光脉冲包络示意图

我们考虑由两个原子实和两个电子组成的类氢分子,它们在强激光场作用下发生电离.所用的激光场的时空分布如图1所示.实验上粒子流一般从光

腰处垂直穿过激光束,因此分子感受到的激光强度在空间上可以近似地认为满足高斯分布.从时间尺度上看,我们用 \sin^2 包络的振荡电场来模拟激光脉冲的开启与关闭.刚开始激光相对较弱,但仍然明显地压低了电子感受到的库仑势垒,以至于最外层电子能够轻易地通过隧穿效应逃离分子实的束缚(图2(a)).隧穿方向由分子中心指向复合场(库仑场和激光电场的叠加)的双曲点,可近似地认为沿着激光场的极化方向(图2(c)).隧穿位置由隧穿前后能量守恒条件唯一确定(图2(a)).为了描述电离波包的扩散,我们给予隧穿电子一定的侧向速度,同时认为沿场方向电子速度为零.内部电子的位置和动量则可由能量值等于分子第二电离能的微正则分布给定^[4].

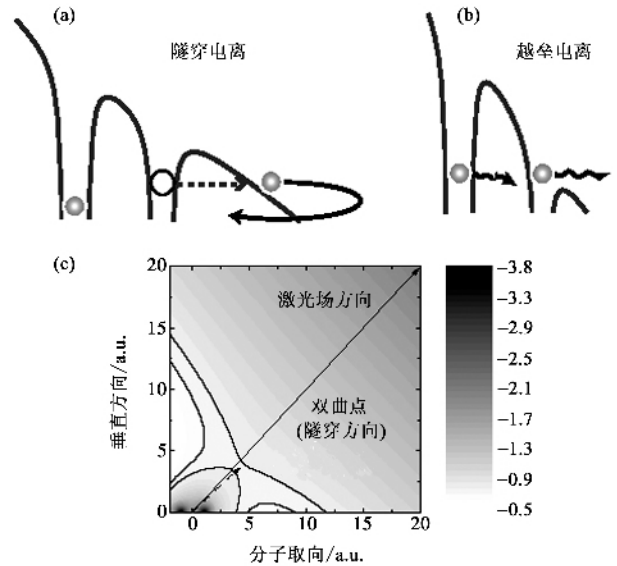


图2 两种场致电离机制 (a)隧穿电离 (b)越垒电离 (c)激光电场与库仑场的叠加形成一个双曲点,这个双曲点决定了电子的隧穿方向,并且近似坐落在激光极化方向上

随着激光强度的进一步提高,激光电场严重扭曲了电子感受到的库仑场,使得价电子几乎可以自由脱离分子实的束缚而电离(图2(b)).这时我们用双电子微正则分布来描述两个电子电离前的状态.这需满足两个条件(1)单电子能量等于分子第一电离能(2)双电子能量等于第一与第二电离能之和^[5].

上述初始条件确定以后,就可以利用牛顿方程准确“预言”电子对的“命运”,并从中获取双电离事例.每个事例具有不同的权重,并由分子ADK公式给定.对整个激光脉冲时间和作用空间上具有不同取向的分子加权求和,得到的离子信号强度能够直接和实验进行比较.图3显示了我们的数值结果和

Cornaggia 研究小组的实验数据^[6]以及 ADK 理论预言的数据之间的对比. 从总体上来说, 数值结果与实验数据在很宽的实验参数区间上都符合得很好. 同时不难看出, 整条曲线可以明显地划分成三个区间: 隧穿区($5 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2 - 1.85 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$), 平台区($1.85 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2 - 5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$)和次序电离区($5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2 - 1 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$). 经典轨道分析表明, 三个参数区间的电离机制是截然不同的, 如图 4 所示.

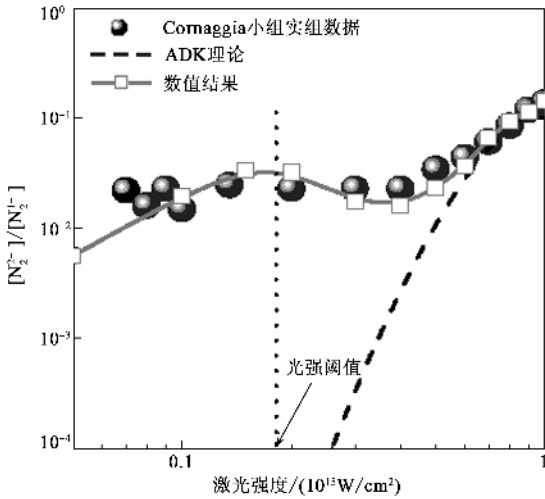


图 3 数值结果与实验数据的比较

如果激光相对较弱, 最外层电子通过隧穿逃离势垒, 然后在激光场驱动下重新回到母核附近, 与内部电子发生强烈碰撞直接导致双电离, 或者激发内部束缚电子后迅速离开^[7]. 激发的电子等到光场再次增强时发生场致电离. 当激光强度超过 $1.85 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 时, 越垒电离开始出现. 该区域的双电离机制最为复杂, 除了与隧穿区相类似的碰撞电离轨道和碰撞激发电离轨道以外, 还有多次碰撞轨道. 这时两个电子先是相互纠缠, 不断碰撞, 最终“排挤”出一个电子. 电离后的电子再次回到母核附近后以类似于前面叙述的方式导致双电离. 随着激光强度进一步提高到次序电离区, 外层电子电离以后, 由于抖动幅度太大, 不容易回到母核附近, 因此整个电离过程中没有明显的碰撞发生, 可以用单电子理论描述. 这时我们的数值结果和 ADK 理论的预言完全吻合.

我们提出的半经典模型将量子隧穿和经典散射巧妙地结合起来, 从而能够定量地描述从隧穿区到越垒区不同激光强度下的双电离过程(图 4), 同时还能够直观地给出不同激光强度下的典型双电离轨道, 帮助理解分子双电离的亚阿秒尺度的微观物理过程. 通过对大量的经典轨道的分析我们发现, 从碰

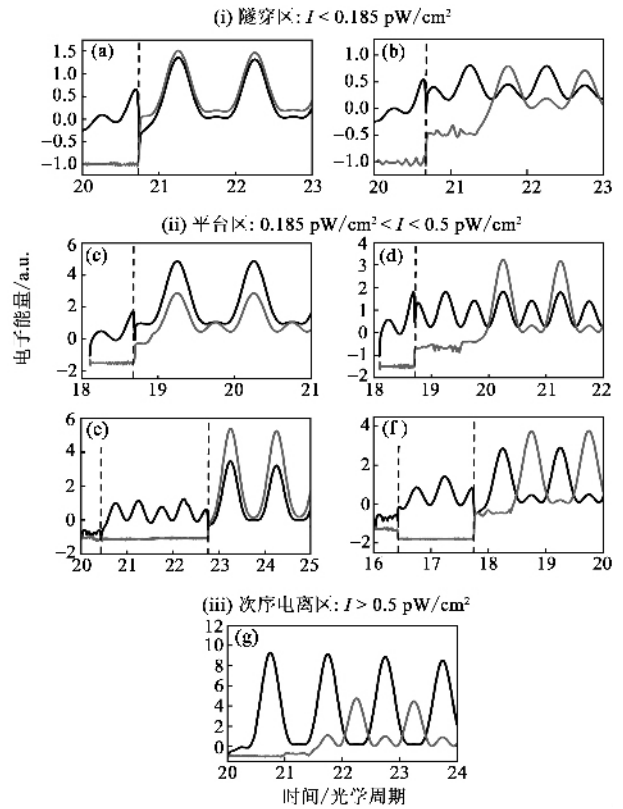


图 4 不同激光强度下的典型双电离轨道

撞到电离有一定的时间延迟, “预热”时间的长短决定了两个电子是在相同方向还是相反方向出射. 同时, 我们还预言了当分子取向与激光场平行时的双电离发生率大约是垂直情况下的两倍. 该结论为评判分子取向技术提供了量化的标准^[8].

总之, 本文中, 我们简要介绍了强场分子双电离的半经典模型及其对实验的成功解释, 关于深入的讨论和详细的结果, 感兴趣的读者可以参考我们最近发表在《Physical Review Letter》上的文章^[3], 并请关注我们近期即将发表的相关工作.

参考文献

[1] Gavrilin M. Atoms in Intense Laser Fields. New York: Academic Press, 1992
 [2] Hu B, Liu J, Chen S G. Phys. Lett. A, 1997, 236: 533; Fu L B, Liu J, Chen J et al. Phys. Rev. A, 2001, 63: 043416; Fu L B, Liu J, Chen S G. Phys. Rev. A, 2002, 65: 021406(R); Chen J, Liu J, Zheng W M. Phys. Rev. A, 2002, 66: 043410
 [3] Liu J, Ye D F, Chen J, et al. Phys. Rev. Lett., 2007, 99: 013003
 [4] Abrines R, Percival I C. Proc. Phys. Soc., 1966, 88: 361; Leopold J G, Percival I C. J. Phys. B, 1979, 12: 709
 [5] Meng L, Reinhold C O, Olson R E. Phys. Rev. A, 1989, 40: 3637
 [6] Cornaggia C, Hering P. Phys. Rev. A, 2000, 62: 023403
 [7] Corkum P B. Phys. Rev. Lett., 1993, 71: 1994
 [8] Zeidler D, Staudte A, Bardon A B et al. Phys. Rev. Lett., 2005, 95: 203003