

强激光场中氢分子非次序双电离电子关联性的研究

杨培辉¹,李超荣¹,吴 艳¹,张自龙²

(1.浙江理工大学理学院,杭州 310018;2.上海大学理学院,上海 200234)

摘 要:采用经典系综方法对关联电子动量分布进行研究,计算结果表明:在直接碰撞电离机制下电子对的关联动量主要分布在一、三象限内,两电子出射方向相同,呈现正相关联特征,在碰撞激发电离机制下电子对的关联动量均匀分布在四个象限内;通过轨道反演分析发现,库伦斥力在碰撞激发电离机制中起主要作用。该研究为强场中氢分子电子对的重碰撞机制研究提供了简单的模型,可显示电子对的运动过程,进而揭示其关联特征。

关键词:非次序双电离;重碰撞;库伦斥力;关联电子

中图分类号: TS195.644

文献标志码: A

文章编号: 1673-3851(2017)04-0598-06

0 引言

强激光场与原子、分子相互作用会发生一系列非线性物理效应,如高次谐波的产生、阈上电离、非次序双电离(nonsequential double ionization, NSDI)等。由于NSDI涉及到电子的关联性,它的动力学现象更为明显。近年来,诸多学者对NSDI的电子关联性进行了广泛而深入地研究。Zhang等^[1]通过关联动量分布,发现原子在低场强下关联电子表现正相关联特征,在高场强下关联电子表现负相关联特征。Ye等^[2]采用半经典模型方法对强场中氢原子的关联动量分布进行了研究,发现关联动量分布呈现V型结构,并分析了原子核的库伦斥力、电子的库伦斥力和电子与场的相互作用对形成V型结构起主要作用。Huang等^[3]研究发现,在少周期低场强激光脉冲下,关联动量分布呈线状结构,并分析了库伦斥力是形成线状结构的主要原因。

在NSDI的研究中,被实验支持且广泛认可的是三步重碰撞理论^[4]。该理论提出电子的重碰撞在NSDI过程中分为三步:首先,原来处于束缚态的电子在强激光场的作用下电离;然后,电离后的电子在电场作用下做变加速运动,从激光场中获得动能;最后,当周期性电场反向时,电子被拉回到母核附近,

与第二个电子发生碰撞。依据三步重碰撞理论,如果碰撞后第二个电子直接电离称为直接电离(recollision-induced ionization, RII);若母核与返回的电子碰撞后第二个电子没有直接电离,而是被碰撞到激发态,然后在场强下再电离,这种称为碰撞激发电离(recollision-induced excitation with subsequent ionization, RESI)。目前对分子NSDI研究虽多,但采用轨道反演方法说明分子NSDI的动力学过程少有报道。本文分别对RII和RESI的电子轨道进行研究,以清楚地显示电子的动力学过程。

本文选取仅包含两个电子的氢分子进行NSDI研究,其优点是没有其它电子的干扰。对于单电子原子的NSDI研究,通过含时薛定谔方程求解的方法被广泛使用且很成功。但是对于含有两个电子的氢分子,需要求解6维的含时薛定谔方程,计算量庞大,使用计算机求解这个方程,需要很长的运算时间和巨大的存储空间。因此本文使用求解含时牛顿运动方程的经典系综方法具有一定的实际意义。

1 理论方法

在强激光场中运动的电子,激光场的线偏振电场强度为:

收稿日期:2016-10-19 网络出版日期:2017-01-03

基金项目:国家自然科学基金项目(11247014);浙江省自然科学基金项目(LQ13A04006);浙江理工大学科研启动项目(1206832-Y)

作者简介:杨培辉(1989-),男,安徽颍上人,硕士研究生,主要从事原子、分子非次序双电离方面的研究。

通信作者:吴 艳, E-mail: phywy@163.com

$$E(t) = E_0 f(t) \cos(\omega t) x \quad (1)$$

其中: E_0 为激光场强振幅; ω 为激光场强频率; $f(t)$ 为脉冲包络函数, 设定为 16 周期的梯形脉冲包络, 这个梯形脉冲包络前 3 个周期强度线性增加, 中间 10 个周期强度保持最大, 后 3 个周期强度线性减小到 0。母核与两电子之间的软核库伦势为:

$$V_{ne}(r_i) = -\frac{1}{\sqrt{r_i^2 + a^2}} \quad (2)$$

其中: r_i 为第 i 个电子的位置; a 为核与电子之间的软核参数, 为了防止自电离, 计算中取 $a = 1.25$ a. u.。电子与电子之间的软核库伦势为:

$$V_{ee}(r_1, r_2) = -\frac{1}{\sqrt{(r_1 - r_2)^2 + b^2}} \quad (3)$$

其中: r_1, r_2 分别为 1、2 个电子的位置; b 为两电子间的软核参数, 计算中取 $b = 0.01$ a. u.。

在研究中, 将电子运动简化在 $x-y$ 平面内^[5]。将氢分子两个核固定在 y 轴 $(0, -1)$ 和 $(0, 1)$ 两点上, 核间距 R 为 2 a. u., 母核与两电子之间的库伦势为:

$$V_{ne}(r_i) = -\frac{1}{\sqrt{x_i^2 + (y_i + 1)^2 + a^2}} - \frac{1}{\sqrt{x_i^2 + (y_i - 1)^2 + a^2}} \quad (4)$$

给定两个电子固定的能量, 动量随机分配给两个电子, 电子动能方向随机, 仅在库伦场下自由运动, 让其运动足够长的时间 (100 a. u.), 然后达到一个的稳定状态分布, 即初态满足高斯分布。

两个电子在激光场强下的运动遵循牛顿运动方程:

$$\frac{d^2 r_i}{dt^2} = -\nabla[V_{ne}(r_i) + V_{ee}(r_1, r_2)] - E(t) \quad (5)$$

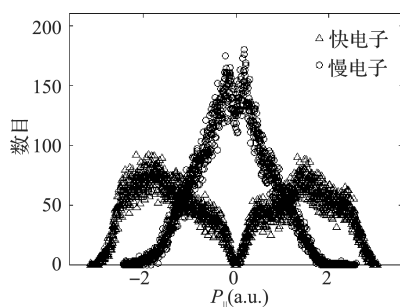
求解式(5)使用标准的 4~5 阶龙格库塔算法。根据能量 E_i , ($i = 1, 2$) 判断是否发生双电离(double ionization, DI), 当 $\frac{P_i^2}{2} - \frac{1}{|r_i|} = E_i > 0$ 时, 表示电子已电离。

2 数值计算及结果分析

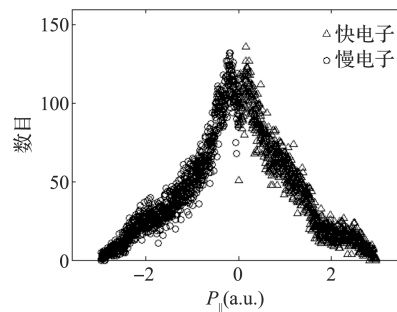
利用数值求解经典牛顿方程, 能够清楚地反映了电子运动的轨道, 有利于进一步分析两个电子的动力学过程。计算中首先选取 7×10^6 个氢分子作为一个系综, 任意给出每个电子的初始位置和速度, 研究该系综在强激光作用下的电子动量分布。在计算中先在 DI 事件中选择初态求解牛顿运动, 然后记录重碰撞和双电离的时间, 根据重碰撞双电离时间来划分 RESI 和 RII, 在 DI 事件中如果两者时间之差的绝对值小于 0.1 周期, 就认为是 RII; 如果两者时间之差绝对值大于 0.5 周期, 就认为是 RESI; 其他的很难界定, 不予考虑。根据重碰撞和双电离时间, 作出电子关联动量分布图和经典轨道图。

2.1 快慢电子的定量分析

本文在 DI 事件中根据不同的状态来定义快慢电子。当电子对同向出射时, 较大动量的电子为快电子, 较小动量的电子为慢电子; 当电子对反向出射时, 带正动量的电子为快电子, 带负动量的电子为慢电子。图 1 是波长为 800 nm、光强为 8×10^{14} W/cm² 的氢分子快慢电子动量分布。在激光场中运动的电子, 电子的最大动量存在一个理论值 $2\sqrt{U_p} = 2.6356$ a. u., 其中有质能 $U_p = \frac{E_0^2}{4\omega^2}$ 。图 1(a) 中快电子最大动量达到 3.0569 a. u., 其值略大于理论值; 而慢电子最大动量达到 2.5893 a. u., 几乎等于理论值。从图 1(a) 中容易看到, 慢电子是以 $P_{\parallel} = 0$ 为对称轴的高斯分布; 快电子则是以 $P_{\parallel} = 0$ 为对称轴的双高斯分布。图 1(b) 中快慢电子最大动量分别为 2.9730、2.9741 a. u., 快慢电子是以 $P_{\parallel} = 0$ 对称轴对称, 这也与实验观察结果^[6] 相符合。图 1 表明同向出射与反向出射都能获得相同的最大动量。在计算中同向出射的电子数是 134664, 反向出射的电子数是 87791, 同向出射电子数大于反向出射电子数, 说明电子对更多的是同向出射, 表现正关联性。



(a) 同向出射快慢电子动量分布



(b) 反向出射快慢电子动量分布

图 1 快慢电子动量分布

2.2 漂移动量和初始动量

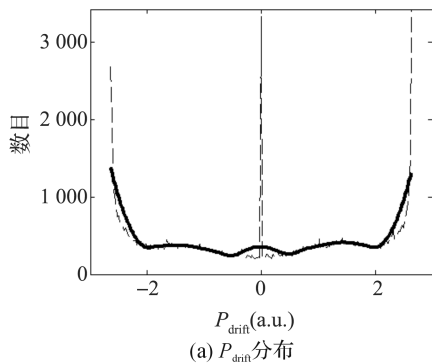
电子在激光场中能够获得一个漂移动量 P_{drift} 使其加速运动, P_{drift} 的分布如图 2(a)。在重碰撞之后电子有一个初始动量 P_{initial} , P_{initial} 的分布如图 2(b)。电子的末态动量 P_{final} 是 P_{drift} 与 P_{initial} 之和, 电子的漂移动量 P_{drift} 为:

$$P_{\text{drift}} = \int_{t_1} E(t) dt = -\frac{E_0}{\omega} \sin(\omega t_1) \quad (6)$$

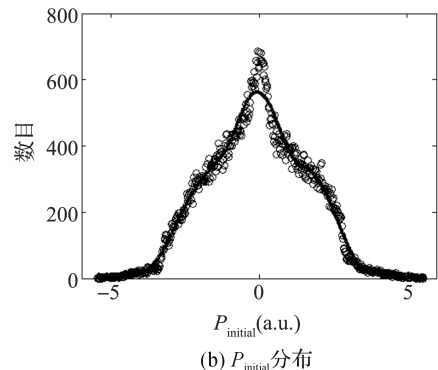
其中: t_1 是电离时刻。

如图 2(a) P_{drift} 在最大值 $\frac{E_0}{\omega} \simeq 2.6356$ a. u. 附近

时数量最多; P_{drift} 约在 0 附近时数量最少。依据式 (6), 当 $\sin(\omega t_1) = \pm 1$ 时 P_{drift} 达到最大, 此时 $\cos(\omega t_1) = 0$, 由式 (1) 可以推知 $E(t) = 0$, 因此大多数重碰撞发生在电场改变方向的零值附近。图 2(b) 显示重碰撞之后的 P_{initial} 分布, 光滑后的黑实线是以 0 为对称中心的高斯分布, 这表明大多数电子对在碰撞后 P_{initial} 很小。在接下来的运动中, 电子对主要受到三种相互作用力, 这三种相互作用力分别是原子核与电子之间的库伦引力、电子与电子之间的库伦斥力和激光场强与电子之间相互作用力。



(a) P_{drift} 分布



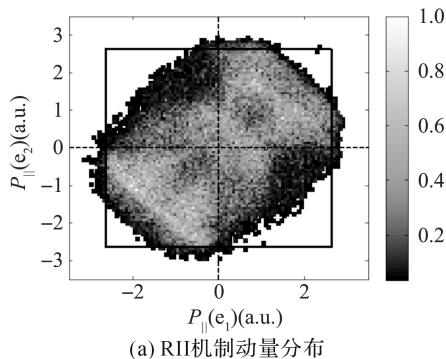
(b) P_{initial} 分布

图 2 不同动量分布

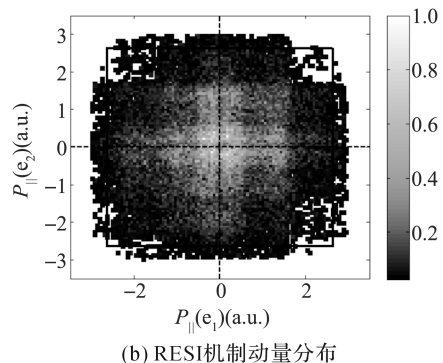
2.3 RESI 和 RII 机制下的动量分布

图 3 中黑色框线 $\pm 2\sqrt{U_p}$ 值^[7] 为经典动量界限, 大多数电子对落在黑色框线内, 只有很小部分落在黑色框线外面, 说明大多数电子对最大动量为 $2\sqrt{U_p}$ 值。对于 RII 机制, 电子关联动量分布在一、二、三、四象限的数目分别是: 32075、21806、35257、

22090, 如图 3(a) 所示主要分布在一、三象限, 两电子表现了正关联。对于 RESI 机制, 电子关联动量分布在一、二、三、四象限的数目分别是: 9249、8916、9575、9009, 如图 3(b) 所示均匀分布在四个象限(十字结构^[8]), 说明两个电子可能同向或反向出射。



(a) RII机制动量分布



(b) RESI机制动量分布

图 3 不同机制下动量分布

2.4 RESI 和 RII 机制下的轨道

图 4 左列是 RII 机制下电子对的轨道; 右列是 RESI 机制下的电子对的轨道。黑色虚线是激光场强

的变化。分别作出能量、y 方向的动量 P_y 、x 方向的动量 P_x 和坐标 x 随周期的变化图。图 4 中虚线为激光场强随周期的变化。

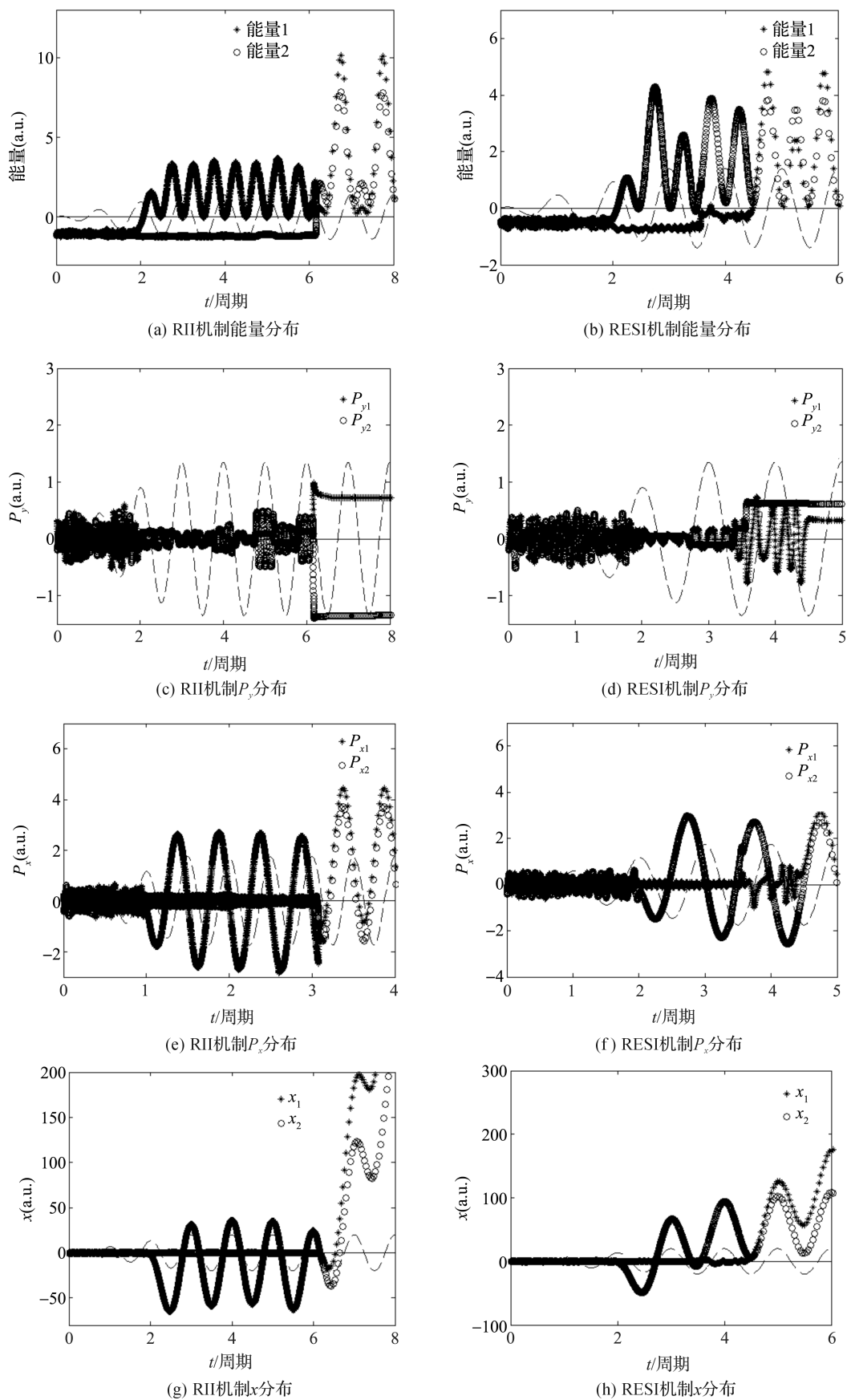


图 4 不同机制的轨道

在 RII 机制下,如图 4(a)(c)(e)(g) 所示,当 $t = 6.2$ 周期附近时,两电子发生重碰撞。重碰撞发生的瞬间在激光场强最小值附近,此时场强的影响可以忽略。由于电子与母核之间距离较大,库伦引力较弱。所以在重碰撞之后起主要作用的是电子与电子之间的库伦斥力,这种情况一直持续到场强增加到某个值或足够长的时间。从图 4(a) 中可以看出,第一个电子先电离,获得相对较高的能量,在激光场反向作用下返回到母核,携带相对较高的能量与第二个电子发生重碰撞;第二个电子获得能量并电离。一旦第二个电子碰撞出来,立即加速出射如图 4(g)。此时,第二个电子与第一个电子出射方向相同,关联动量主要分布在一、三象限,两电子表现出正相关联特征,如图 3(a)。在接下来的运动中,两个电子在 x 方向以不同与激光场强的相位振动,如图 4(e)。两个电子对在 y 方向上则以相反方向运动,如图 4(c)。

在 RESI 机制下,如图 4(b)(d)(f)(h) 所示,当 $t = 3.6$ 周期附近时,两电子发生重碰撞。重碰撞发生的瞬间在激光场强最大值附近,此时库伦力影响相对很小,第一个电子携带的能量不足以直接碰撞出第二个电子,第二个电子先被碰撞到激发态,最终在激光场强作用下电离。第二个电子的出射方向与第一个电子无关,其方向可能与第一个电子同向或反向,两个电子之间没有表现出关联性,关联动量均匀分布在四个象限内,如图 3(b)。

3 结 论

本文使用经典系综方法,研究了强场中氢分子 NSDI 电子的关联性。研究表明,RESI 机制的电子对关联动量均匀分布在四个象限内,第二个电子出射方向与第一个电子出射方向可能相同也可能相反,两个电子没有表现出关联性。而 RII 机制的电子对关联动量主要分布在一、三象限,第二个电子出射方向与第一个电子出射方向相同,表现出正关联性。进一步通过电子经典轨道反演分析,可以发现电子的库伦斥力在 RII 机制中起到主要的作用。

参考文献:

- [1] ZHANG Z, ZHANG J, BAI L, et al. Transition of correlated-electron emission in nonsequential double ionization of Ar atoms. [J]. Optics Express, 2015, 23(6):7044-52.
- [2] YE D F, LIU X, LIU J. Classical trajectory diagnosis of a fingerlike pattern in the correlated electron momentum distribution in strong field double ionization of helium[J]. Physical Review Letters, 2008, 101(23): 275-278.
- [3] HUANG C, GUO W, ZHOU Y, et al. Role of Coulomb repulsion in correlated-electron emission from a doubly excited state in nonsequential double ionization of molecules[J]. Physical Review Letters, 2016, 93(1): 013416.
- [4] CORKUM P B. Plasma perspective on strong field multiphoton ionization [J]. Physical Review Letters, 1993, 71(13):1994-1997.
- [5] WANG X, EBERLY J H. Effects of elliptical polarization on strong-field short-pulse double ionization. [J]. Physical Review Letters, 2009, 103(10): 103007-103010.
- [6] LIU Y, FU L, YE D, et al. Strong-field double ionization through sequential release from double excitation with subsequent Coulomb scattering. [J]. Physical Review Letters, 2014, 112(1):013003.
- [7] HAAN S L, BREEN L, KARIM A, et al. Variable time lag and backward ejection in full-dimensional analysis of strong-field double ionization[J]. Physical Review Letters, 2006, 97(10):103008.
- [8] BERGUES B, KÜBEL M, JOHNSON N G, et al. Attosecond tracing of correlated electron-emission in non-sequential double ionization [J/OL]. Nature Communications, 2012. <http://doi: 10. 1038/ncomms1807>.

Investigation on Electron Correlation of Nonsequential Double Ionization of Hydrogen Molecules in Strong Laser Fields

YANG Peihui¹, LI Chaorong¹, WU Yan¹, ZHANG Zilong²

(1. School of Sciences, Zhejiang Sci-Tech University, Hangzhou 310018, China; 2. College of Sciences, Shanghai University, Shanghai 200234, China)

Abstract: In this paper, we use the classical ensemble method to investigate the correlated electron momentum distribution. The results show that the correlated electron momentum of electron pair is distributed mainly in the first and third quadrants under direct collision ionization mechanism and emission direction of the two electrons is the same and shows positive electron correlation. The correlated momentum of electron pair is evenly distributed in the four quadrants under collision excitation ionization mechanism. The trajectory back analysis shows that the coulomb repulsion plays an important role in the collision excitation ionization mechanism. The study provides a simple model for the recollision mechanism research of hydrogen molecule electron pair in a strong field, and the motion process of electron pair can be shown to reveal the correlation characteristics.

Key words: nonsequential double ionization; recollision; coulomb repulsion; correlated electron

(责任编辑: 康 锋)