

# 啁啾激光场对 $H_2^+$ 电离及解离的影响

李 义<sup>1</sup>, 刘 航<sup>2</sup>, 冯立强<sup>1,2</sup>

(1. 辽宁工业大学 理学院, 锦州 121001; 2. 辽宁工业大学 化学与环境工程学院, 锦州 121001)

**摘要:** 理论研究了两种不同啁啾激光场对  $H_2^+$  电离以及解离几率的影响. 结果表明: 在二阶啁啾场下,  $H_2^+$  的电离和解离几率会随着啁啾参数由负向到正向的变化而呈现线性减小. 在三阶啁啾场下,  $H_2^+$  的电离和解离几率随着啁啾参数的变化呈现‘W’形结构, 并且最大电离和解离出现在啁啾参数为 0.01 处.

**关键词:** 电离几率; 解离几率; 啁啾激光场

**中图分类号:** O562.4 **文献标识码:** A **DOI:** 10.19907/j.0490-6756.2021.014001

## Effect of chirp field on ionization and dissociation of $H_2^+$

LI Yi<sup>1</sup>, LIU Hang<sup>2</sup>, FENG Li-Qiang<sup>1,2</sup>

(1. College of Science, Liaoning University of Technology, Jinzhou 121001, China;

2. School of Chemical and Environmental Engineering, Liaoning University of Technology, Jinzhou 121001, China)

**Abstract:** The effects of two different chirped pulses on ionization and dissociation probabilities of  $H_2^+$  have been investigated theoretically. The results show that for the case of two-order chirped pulse, the ionization and dissociation probabilities of  $H_2^+$  are linearly decreased as chirp parameters change from negative values to positive values. For the case of three-order chirped pulse, the ionization and dissociation probabilities of  $H_2^+$  present the ‘W’ structure as chirp parameters change, and the maximum ionization and dissociation appear at the chirp parameter being 0.01.

**Keywords:** Ionization probability; Dissociation probability; Chirped pulse

## 1 引言

$H_2^+$  或  $H_2$  分子作为常见的基本粒子, 研究其反应和结构是物理、化学、生物、材料等领域的基础<sup>[1-5]</sup>. 近十年, 随着超强飞秒( $10^{-15}$  s)脉冲的产生使得人们可以实时观测  $H_2^+$  级  $H_2$  的超快动力学现象<sup>[1-2]</sup>. 例如: 电离和解离过程<sup>[3]</sup>、高次谐波过程<sup>[4]</sup>、库伦爆炸过程<sup>[5]</sup>.

在上述现象中, 电离和解离过程作为发生后续现象的前提条件以及基础过程被广泛研究. 例如: Gao 等<sup>[6]</sup> 研究了  $H_2^+$  振动态对其电离及解离几率

的影响. Feng 等<sup>[7]</sup> 研究了噪声信号对于  $H_2^+$  电离及解离几率的影响. Liu 等<sup>[8]</sup> 研究了激光脉宽及激光强度对于  $H_2^+$  电离及解离几率的影响. Liu 等<sup>[9]</sup> 研究了同位素效应在  $H_2^+$ 、 $D_2^+$ 、 $T_2^+$  电离及解离中的作用. Liu 等<sup>[10]</sup> 和 Feng 等<sup>[11]</sup> 研究了空间非均匀场下  $H_2^+$  电离及解离几率的分布.

虽然  $H_2^+$  电离及解离过程被广泛研究, 但是多数报道中激光场的波形为高斯型激光场, 啁啾激光场对于  $H_2^+$  电离及解离过程的研究却少有报道. 因此, 本文理论研究在啁啾激光场驱动下,  $H_2^+$  电离及解离几率的变化. 通过本文的研究可以给实

收稿日期: 2019-06-19

基金项目: 国家自然科学基金(11504151); 辽宁省自然科学基金; 辽宁省教育厅基础研究项目

作者简介: 李义(1977-), 男, 辽宁锦州人, 博士, 副教授, 研究方向为激光技术.

通讯作者: 冯立强. E-mail: lqfeng1101@126.com

验人员提供有效的数据参考.

## 2 计算方法

$H_2^+$  与外场作用的薛定谔方程可描述为<sup>[12-16]</sup>,

$$i \frac{\partial \psi(z, R, t)}{\partial t} = H(t) \psi(z, R, t) \quad (1)$$

$$H(t) = T_N + T_e + V(z, R) + zE(t) \quad (2)$$

$$T_N = -\frac{1}{m_p} \frac{\partial^2}{\partial R^2}$$

$$T_e = -\frac{2m_p + 1}{4m_p} \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$V(z, R) = 1/R - 1/\sqrt{(z-R/2)^2 + 1} - 1/\sqrt{(z+R/2)^2 + 1} \quad (3)$$

$$E(t) = E \exp[-4 \ln(2) t^2 / \tau^2] \cos(\omega_1 t + \delta_{1,2}) \quad (4)$$

其中,  $m_p$  为 H 核质量;  $R, z$  为核与电子的自由度;  $T_N, T_e$  表示核与电子动能;  $V(z, R)$  为  $H_2^+$  势能;  $E(t)$  为激光场;  $\omega_1, E$  为激光频率和激光强度;  $\delta_1 = -\beta_1 \omega_1 t^2 / T$  和  $\delta_2 = -\beta_2 \omega_1 t^3 / T$  分别为二阶和三阶啁啾调控相位, 其中  $\beta_{1,2}$  为啁啾参数,  $T$  为激光光学周期.

## 3 结果与讨论

图 1(a) 给出了  $H_2^+$  在 5 fs-800 nm, 激光强度为  $5.0 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$  的两阶啁啾激光驱动下电离几率随啁啾参数变化的谱图. 由图可知, 在两阶啁啾

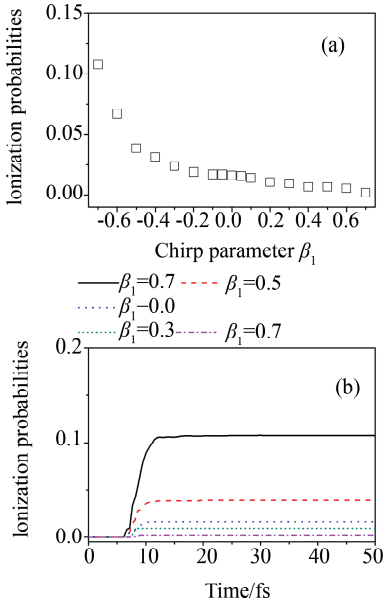


图 1 (a) 电离几率随两阶啁啾参数变化图; (b) 具体条件下电离几率

Fig. 1 (a) The change of ionization probability as a function of 2-order chirp parameter; (b) the ionization probabilities from specific chirp parameters

激光场驱动场下,  $H_2^+$  在负向啁啾调控下的电离几率要明显大于正向啁啾调控下的电离几率. 并且电离几率随着啁啾参数从负向到正向变化而呈线性减小趋势. 图 1(b) 给出了啁啾参数为  $\beta_1 = -0.7, -0.5, 0.0, 0.3, 0.7$  下  $H_2^+$  的具体电离曲线. 由图可知, 在负向啁啾调控下, 不仅电离几率大于正向啁啾调控; 而且电离时间也有所提前. 通过图 1 分析可知, 在二阶啁啾调控场下, 人们可以利用负向啁啾调控来是  $H_2^+$  提前电离以及增大电离几率.

图 2(a) 给出了  $H_2^+$  在上述三阶啁啾激光驱动下电离几率随啁啾参数变化的谱图. 由图可知,  $H_2^+$  的电离几率在三阶啁啾驱动场下呈现 ‘W’ 形状, 并且最大电离出现在  $\beta_2 = 0.01$  处. 这里需要说明: 由于电离几率在  $|\beta_2| > 0.4$  后增大的比率不明显, 因此 ‘W’ 形状不太明显. 图 2(b) 给出了啁啾参数为  $\beta_2 = -0.5, -0.01, 0.0, 0.01, 0.5$  下  $H_2^+$  的具体电离曲线. 由图可知, 当  $\beta_2 = 0.01$  时,  $H_2^+$  的电离几率不仅达到最大值, 而且其电离时间也明显比其它啁啾参数调控下有所提前. 经上述分析可知, 在三阶啁啾调控下, 人们可以在较小的正向啁啾下获得较大的电离几率.

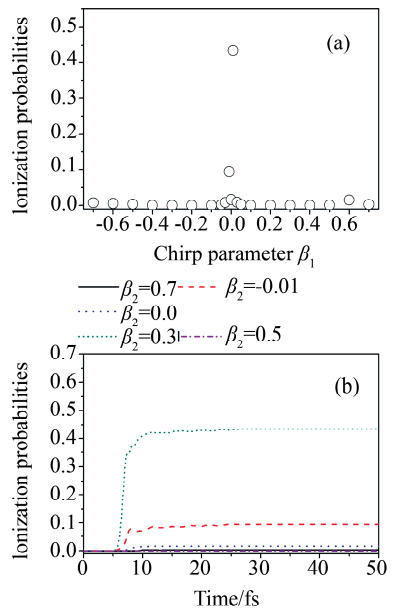


图 2 (a) 电离几率随三阶啁啾参数变化图; (b) 具体条件下电离几率

Fig. 2 (a) The change of ionization probability as a function of 3-order chirp parameter; (b) the ionization probabilities from specific chirp parameters

图 3(a) 给出了  $H_2^+$  在上述二阶啁啾激光驱动下电离几率随啁啾参数变化的谱图. 为了  $H_2^+$  充

分解离, 波包传播时间延伸到 200 fs. 由图可知, 在两阶啁啾驱动场下,  $H_2^+$  在正向啁啾调控下很难解离, 但在负向啁啾调控下, 解离几率明显增大. 并且解离几率随着啁啾参数从负向到正向变化而呈线性减小趋势. 图 3(b) 给出了啁啾参数为  $\beta_1 = -0.7, -0.5, 0.0, 0.3, 0.6$  下  $H_2^+$  的具体解离曲

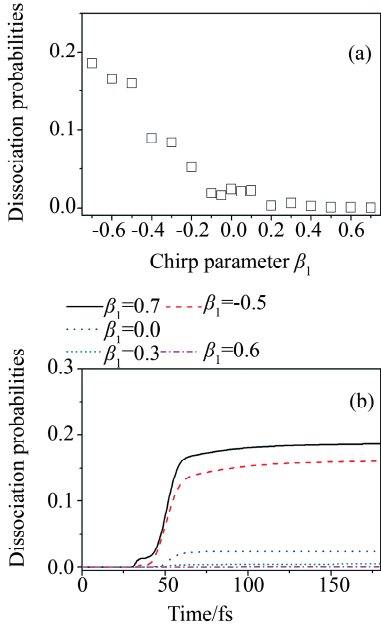


图 3 (a) 解离几率随二阶啁啾参数变化图; (b) 具体条件下解离几率  
 Fig. 3 (a) The change of dissociation probability as a function of 2-order chirp parameter; (b) the dissociation probabilities from specific chirp parameters

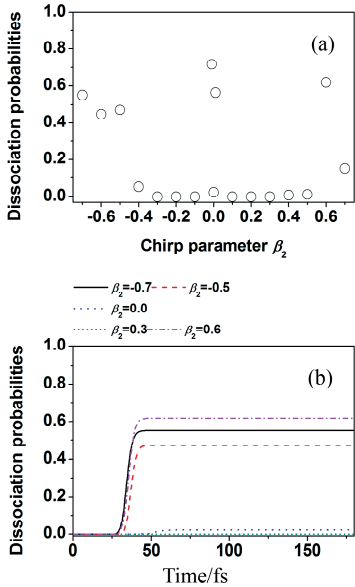


图 4 (a) 解离几率随三阶啁啾参数变化图; (b) 具体条件下解离几率  
 Fig. 4 (a) The change of dissociation probability as a function of 3-order chirp parameter; (b) the dissociation probabilities from specific  $\beta_2$  parameters

线. 由图可知, 在正向啁啾调控下, 解离几率很小, 并且要发生在 100 fs 之后. 但在正向啁啾调控下, 解离几率不仅增大, 而且可以提前发生. 例如, 当  $\beta_1 = -0.7$  时,  $H_2^+$  在 30 fs 之后就可以发生解离.

图 4(a) 给出了  $H_2^+$  在上述三阶啁啾激光驱动下解离几率随啁啾参数变化的谱图. 由图可知, 在三阶啁啾驱动场下,  $H_2^+$  在的解离几率依然可以呈现 ‘W’ 形状. 并且最大解离出现在  $\beta_2 = 0.01$  处. 图 4(b) 给出了啁啾参数为  $\beta_1 = -0.7, -0.5, 0.0, 0.01, 0.3$  下  $H_2^+$  的具体解离曲线. 由图可知, 当  $\beta_2 = 0.01$  时,  $H_2^+$  的解离几率不仅达到最大值, 而且其解离时间也比其它啁啾参数调控下有所提前.

### 4 结 论

本文理论研究了  $H_2^+$  在不同啁啾调控下电离几率及解离几率的变化. 结果发现, 在二阶啁啾调控下,  $H_2^+$  的电离和解离几率会随着啁啾参数由负向到正向的变化而呈现线性减小. 在三阶啁啾调控下,  $H_2^+$  的电离和解离几率随着啁啾参数的变化呈现 ‘W’ 形结构, 并且最大电离和解离出现在啁啾参数为 0.01 处. 通过本文的研究, 人们可以利用啁啾调控来实现  $H_2^+$  电离、解离几率的增大或减小以及电离、解离时间的提前和延后. 这给实验人员提供了有效的数据参考.

### 参考文献:

- [1] Krausz F, Ivanov M. Attosecond physics [J]. Rev Mod Phys, 2009, 81: 163.
- [2] 冯立强, 刘航, 刘辉. 空间均匀和非均匀场下  $H_2^+$  辐射谐波的空间分布 [J]. 激光技术, 2017, 41: 467.
- [3] Feng L Q. Molecular harmonic extension and enhancement from  $H_2^+$  ions in the presence of spatially inhomogeneous fields [J]. Phys Rev A, 2015, 92: 053832.
- [4] 冯立强, 刘航, 李义. 利用啁啾激光调制分子谐波信号 [J]. 原子与分子物理学报, 2019, 36: 268.
- [5] Roudnev V, Esry B D, Itzhak I B. Controlling  $HD^+$  and  $H_2^+$  dissociation with the carrier-envelope phase difference of an intense ultrashort laser pulse [J]. Phys Rev Lett, 2004, 93: 163601.
- [6] 高丽, 李建, 朱爱军, 等. 利用高振动态  $H_2^+$  增强谐波及脉冲强度 [J]. 辽宁工业大学学报: 自然科学版, 2018, 38: 98.
- [7] Feng L Q, Chu T S. Intensity enhancement in the molecular ionization and dissociation dynamics in the

- presence of noise [J]. *J Mol Model*, 2012, 18: 5097.
- [8] Liu H, Li W L, Feng L Q. Chirp control of multi-photon resonance ionization and charge resonance enhanced ionization on molecular harmonic generation [J]. *Chem Phys Lett*, 2017, 676: 118.
- [9] Liu H, Castle R S, Feng L Q. Internuclear distance R-distribution of high-order harmonic generation from  $H_2^+$  and its isotopes [J]. *Chem Phys*, 2017, 485-486: 1.
- [10] 刘航, 刘辉, 冯立强.  $H_2^+$  在空间非均匀场下的电离解离行为[J]. *辽宁工业大学学报: 自然科学版*, 2017, 37: 44.
- [11] Feng L Q, Li W L. Nuclear signature effect on spatial distribution of molecular harmonic in the presence of spatial inhomogeneous field [J]. *Laser Phys*, 2017, 27: 016002.
- [12] 冯立强.  $H_2^+$  分子双 H 核对高次谐波辐射的贡献 [J]. *原子与分子物理学报*, 2018, 35: 267.
- [13] 冯立强. 核运动对  $H_2^+$  谐波辐射的影响[J]. *辽宁工业大学学报: 自然科学版*, 2017, 37: 355.
- [14] 刘航, 刘辉, 孟凡顺, 等. 双色线偏振激光场驱动  $H_2^+$  分子产生椭圆偏振阿秒脉冲[J]. *原子与分子物理学报*, 2017, 34: 899.
- [15] Feng L Q, Li Y, Feng A Y. Nano-plasmonic-pump-probe effect on the intensity enhancement of attosecond pulse from hydrogen molecular ion[J]. *Laser Phys Lett*, 2018, 15: 115301.
- [16] Feng L Q, Chu T S. Generation of an isolated sub-40-as pulse using two-color laser pulses: combined chirp effects [J]. *Phys Rev A*, 2011, 84: 053853.

**引用本文格式:**

中文: 李义, 刘航, 冯立强. 啁啾激光场对  $H_2^+$  电离及解离的影响[J]. *四川大学学报: 自然科学版*, 2021, 58: 014001.

英文: Li Y, Liu H, Feng L Q. Effect of chirp field on ionization and dissociation of  $H_2^+$  [J]. *J Sichuan Univ: Nat Sci Ed*, 2021, 58: 014001.