

激光场中原子阈上电离的强场近似方法研究

仝小刚¹, 薛玉峰¹, 张治国¹, 杨淑萍²

(1. 陇南师范高等专科学校 机电工程学院, 陇南 742500; 2. 陕西理工大学 数学与计算机科学学院, 汉中 723000)

摘要: 强激光与原子相互作用的基本现象是原子的电离, 其中阈上电离是一种非常重要的强场电离现象, 许多方法被用于研究激光场中原子的阈上电离性质, 其中强场近似方法是十分重要的理论方法之一。本文利用时间演化算符及鞍点近似论述了激光场中单原子阈上电离行为的二级强场近似理论, 其中一阶近似项给出低能电子的直接电离振幅, 二阶近似项描述电子与母离子的重散射过程, 表示高能光电子的电离振幅。文章给出了强场近似理论下线性极化的激光场中光电子能谱和电离概率, 为应用强场近似方法模拟研究激光场中单原子的动力学行为提供了一定的理论参考和依据。

关键词: 阈上电离; 强场近似; Schrödinger 方程; 时间演化算符; 鞍点近似

中图分类号: O437

文献标志码: A

DOI: 10.19855/j.1000-0364.2025.024002

Study on the strong field approximation method for above threshold ionization of atom in laser field

TONG Xiao-Gang¹, XUE Yu-Feng¹, ZHANG Zhi-Guo¹, YANG Shu-Ping²

(1. School of Mechanical and Electrical Engineering, Longnan Teachers College, Longnan 742500, China;

2. School of Mathematics and Computational Science, Shaanxi University of Technology, Hanzhong 723000, China)

Abstract: The basic phenomenon of the interaction between intense laser and atom is ionization of atom, among which the above - threshold ionization is a very important phenomenon. Many methods have been used to study the properties of above - threshold ionization of atom in laser field, and the strong field approximation method is one of the very important theoretical methods. In this paper, the second order strong field approximation theory under perturbation theory is derived by using the time evolution operator and saddle point approximation method, the first order approximation term gives the direct ionization amplitude of low energy electron, the second order approximation term describes the rescattering process of electron and parent ion, and represents the ionization amplitude of high energy photoelectron. The photoelectron spectra and ionization probability of single atom in linearly polarized laser field are given, which provides a theoretical reference and basis for the simulation and study of the kinetic behavior of atoms in laser field under the strong field approximation theory.

Key words: Above - threshold ionization; Strong field approximation; Schrödinger equation; Time evolution operator; Saddle point approximation.

1 引言

激光的产生引起了一场技术革命^[1], 它为人类探测微观物质动力学过程提供了前所未有的观测手段。强激光与原子相互作用的基本现象就是

原子的电离, 一个多世纪以来, 原子在激光场中的电离一直是物理学家关注的焦点, 它是揭示和表征强激光与物质相互作用过程的有力工具, 更是其它一切后续物理过程的基础, 比如高次谐波的产生, 高阶阈上电离^[2], 非次序双电离^[3]等,

收稿日期: 2023-06-14

基金项目: 甘肃省高等学校教师创新基金项目(2023B-417, 2023B-415)

通信作者: 仝小刚(1975—), 男, 副教授, 博士研究生, 原子与分子物理专业. E-mail: tongxgxx@163.com

这些后续强场过程的研究都依赖于对电离过程的理解. 根据激光参数的不同, 电离通常分为以下三种机制: 多光子电离, 隧穿电离和越垒电离. 这三种电离机制可用 Keldysh^[4] 参数 $\gamma = \sqrt{I_p/2U_p}$ 大概来确定, 这里 I_p 是原子的电离能, U_p 是自由电子在激光场中的有质动力能, $U_p = E_0^2/4\omega^2$, 其中 E_0 为激光电场的振幅, ω 为激光的角频率. $\gamma \geq 1$ 是多光子电离, 其能量谱由一些分立的峰组成, 峰与峰的间隔等于单个光子能量; $\gamma \leq 1$ 是隧穿电离, $\gamma \ll 1$ 是越垒电离, 这些电离情形也被称为阈上电离.

作为一种非常重要的强场电离现象, 阈上电离一直是强场物理的研究热点之一. 阈上电离光电子能量谱开始时以指数方式衰减, 并且在 $2U_p$ 处有一个截止能量, 在此之后产生一个高能平台一直延伸到 $10 U_p$, 然后能量出现截止^[5]. 阈上电离可由半经典图像来解释, 处于超短超强激光场中的原子, 其束缚电子首先发生多光子或隧穿电离释放出光电子并在激光场中运动, 光电子在激光场中震荡要么直接电离, 要么被激光场拉回母离子附近以一定的概率与其发生复合或者再散射, 形成许多非线性物理过程. 根据 Corkum 的再散射模型^[6], 强激光场中的束缚电子越过势垒后, 大概经过 3/4 个光学周期后返回母离子附近, 如果与母离子发生弹性散射, 则会产生高阶阈上电离; 若与基态复合就会发射出高次谐波; 若与母离子发生非弹性碰撞, 则会发生非序次双电离.

研究强激光场中原子的阈上电离性质的两种重要理论方法是数值求解含时薛定谔方程方法 (TDSE)^[7] 和强场近似 (SFA)^[8,9] 方法. TDSE 方法在处理有关强度较低的短脉冲作用下的电离问题时, 能够得到比较理想的结果, 然而涉及到激光脉冲较长, 强度较高的电离问题时会出现一定困难. 强激光场中的原子或分子, 当其最外层电子被激发到较高的激发态或连续态时, 激光场对它们的作用远远大于这些电子受到原子核或原子实的库仑作用, 在此情况下, 就可以忽略原子核对电子的库仑作用而将这些高激发态的电子看作准自由电子, 这就是强场近似方法基本原理. 强场近似方法计算比较简单, 但采用了很多近似, 因此精确度不太高, 常用来做定性分析. 强场近似理论方法中, 除了最基本的强场近似方法, 还有考虑库仑相互作用的 Coulomb - Volkov 近似, 鞍点近似等, 另外还有量子重散射理论模型、含时

密度泛函理论等都对强场电离现象进行解释和模拟.

理论上通过求解含时 Schrödinger 方程就可以精确求解原子在强激光场中的电离问题, 但求解 Schrödinger 方程很耗时, 采用强场近似理论对各种强场现象进行探讨是一个非常重要的研究方向, 本文以激光场中单原子的电离情形为研究对象, 在微扰论下论述其强场近似理论研究方法, 以期深入理解基本概念, 提高应用强场近似方法处理具体问题的能力.

2 强场近似方法

研究强激光场作用下原子的单电离时, 在微扰理论下从基态跃迁到连续态且渐近动量为 \vec{p} 的光电子的电离振幅微扰级数的准确表达式 $f(\vec{p})$ 表示为^[10, 11] (均使用原子单位):

$$f(\vec{p}) = -i \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt' \langle \Psi_{\vec{p}}(t) | U(t, t') H_i(t') | \Psi_0(t') \rangle \quad (1)$$

式中 $\Psi_0(t')$ 是原子基态波函数, $\Psi_{\vec{p}}(t)$ 是动量为 \vec{p} 的电子的散射态波函数, $U(t, t')$ 是总哈密顿算符 $H(t) = H_a + H_i(t)$ 的时间演化算符, 其中 $H_a = -\frac{1}{2} \nabla^2 + V(\vec{r})$ 为原子的哈密顿算符, $V(\vec{r})$ 为原子的模型势; $H_i(t) = \vec{r} \cdot \vec{E}(t)$ 是偶极近似和长度规范下激光场与原子的相互作用项, 这里 \vec{r} 是光电子的位矢, $\vec{E}(t)$ 是激光场的电场强度. $U(t, t')$ 是时间演化算符, 满足如下 Dyson 方程:

$$U(t, t') = U_F(t, t') - i \int_{t'}^t dt'' U_F(t, t'') V U(t'', t') \quad (2)$$

这里 $U_F(t, t')$ 是激光场中自由电子的哈密顿算符 $H_F = -\frac{1}{2} \nabla^2 + \vec{r} \cdot \vec{E}$ 所对应的时间演化算符, $H_F(t)$ 的含时薛定谔方程对应的本征态为连续态 Volkov 态, 其表达式为

$$\chi_{\vec{p}}(t) = | \vec{p} + \vec{A}(t) \rangle \exp[-i S_{\vec{p}}(t)] \quad (3)$$

$S_{\vec{p}}(t)$ 表示电子的准经典作用量:

$$S_{\vec{p}}(t) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^t dt' [\vec{p} + \vec{A}(t')]^2 \quad (4)$$

$\vec{A}(t)$ 表示激光场的矢势. 平面波波矢写为:

$$\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{r} \cdot \vec{k}) \quad (5)$$

相应于初始 Hamiltonian 下的把激光场中 t' 时刻对应的连续态演化到 t 时刻所对应的态的 Godon

-volkov 时间演化算符为

$$U_F(t, t') = \int d\vec{k} |\chi_k(t)\rangle \langle \chi_k(t')| \quad (6)$$

用 $U_F(t'', t')$ 近似代替方程(2)中的 $U(t, t')$, 再用 $\chi_k(t)$ 近似代替方程(1)中的 $\Psi_p(t)$, $U(t, t')$ 只取前两项, 于是得到二级强场近似下的光电子电离振幅:

$$\begin{aligned} f(\vec{p}) &= -i \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt' \langle \Psi_p(t) | U(t, t') H_i(t') | \Psi_0(t') \rangle \\ &= -i \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt' \langle \chi_p(t) | [U_F(t, t') - \\ &\quad i \int_{t'}^t dt'' U_F(t, t'') V U_F(t'', t')] H_i(t') | \Psi_0(t') \rangle \\ &= -i \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt' \langle \chi_p(t) | U_F(t, t') H_i(t') | \Psi_0(t') \rangle - \\ &\quad \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt' \langle \chi_p(t) | \\ &\quad \int_{t'}^t dt'' U_F(t, t'') V U_F(t'', t') H_i(t') | \Psi_0(t') \rangle \\ &= f^{(1)}(\vec{p}) + f^{(2)}(\vec{p}) \quad (7) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\vec{p}) &= -i \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt' \langle \chi_p(t) | \\ &\quad U(t, t') H_i(t') | \Psi_0(t') \rangle \\ &= -i \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt' \int d\vec{k} \langle \chi_p(t) | \chi_k(t) \rangle \\ &\quad \langle \chi_k(t') | H_i(t') | \Psi_0(t') \rangle \\ &= -i \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt' \langle \chi_p(t') | H_i(t') | \Psi_0(t') \rangle \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \chi_p(t) | H_i(t) | \Psi_0(t) \rangle \quad (8) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f^{(2)}(\vec{p}) &= -\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt' \langle \chi_p(t) | \\ &\quad \int_{t'}^t dt'' U_F(t, t'') V U_F(t'', t') H_i(t') | \Psi_0(t') \rangle \\ &= -\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt' \langle \chi_p(t) | \int_{-t}^t dt'' \int d\vec{k}_1 |\chi_{k_1}(t'')\rangle \langle \chi_{k_1}(t'') | \\ &\quad V \int d\vec{k}_2 |\chi_{k_2}(t'')\rangle \langle \chi_{k_2}(t') | H_i(t') | \Psi_0(t') \rangle \\ &= -\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt' \int_{t'}^t dt'' \int d\vec{k}_2 \int d\vec{k}_1 \langle \chi_p(t) | \chi_{k_1}(t) \rangle \\ &\quad \langle \chi_{k_1}(t'') | V | \chi_{k_2}(t'') \rangle \langle \chi_{k_2}(t') | H_i(t') | \Psi_0(t') \rangle \\ &= -\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt' \int_{t'}^t dt'' \int d\vec{k}_2 \int d\vec{k}_1 \delta(\vec{p} - \vec{k}_1) \\ &\quad \langle \chi_{k_1}(t'') | V | \chi_{k_2}(t'') \rangle \langle \chi_{k_2}(t') | H_i(t') | \Psi_0(t') \rangle \\ &= -\lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-t}^t dt' \int_{t'}^t dt'' \int d\vec{k}_2 \langle \chi_p(t'') | V | \chi_{k_2}(t'') \rangle \\ &\quad \langle \chi_{k_2}(t') | H_i(t') | \Psi_0(t') \rangle \\ &= -\int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{t'}^t dt' \langle \chi_p(t') | V \int d\vec{k} |\chi_k(t')\rangle \end{aligned}$$

$$\langle \chi_k(t) | H_i(t) | \Psi_0(t) \rangle \quad (9)$$

需要说明的是, $f^{(1)}(\vec{p})$ 是标准的强场近似电离振幅表示式, 称为一级强场近似, 对应于电子的直接电离, 主要描述低能光电子的行为. $f^{(2)}(\vec{p})$ 是二级强场近似, 描述的是电子与母离子的重散射过程, 对应于高能光电子的电离振幅.

首先计算一级强场近似, 可如下进行:

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\vec{p}) &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \chi_p(t) | H_i(t) | \Psi_0(t) \rangle \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \chi_p(t) | \int d\vec{r}' |\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}' | \\ &\quad H_i(t) \int d\vec{r} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r} | \Psi_0(t) \rangle \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d\vec{r} [\chi_p(\vec{r}, t)]^* \vec{r} \cdot \vec{E}(t) \Psi_0(\vec{r}, t) \\ &= -i \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d\vec{r} |\exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \\ &\quad \exp[-iS_p(t)]|^* \vec{r} \cdot \vec{E}(t) \Psi_0(\vec{r}, t) \\ &= -i \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dt E(t) \exp[iS_p(t)] \exp(iI_p t) \times \\ &\quad \int d\vec{r} |\exp(i\vec{q} \cdot \vec{r})| r \cos\theta \Psi_0(\vec{r}) \quad (10) \end{aligned}$$

这里 $\vec{q} = \vec{p} + \vec{A}(t)$, $I_p = -E_0$ 是原子基态 $\Psi_0(\vec{r}, t)$ 的电离能, $\vec{A}(t)$ 是激光电场的矢势, 激光极化方向沿着 z 轴.

基态波函数 $\Psi_0(\vec{r}, t)$ 通过球谐函数展开为:

$$\Psi_0(\vec{r}, t) = R_{nl}(r) Y_{lm}(r) e^{-iEt} \quad (11)$$

其中 E 和 R_{nl} 为基态的能量和径向波函数. 引入新的径向波函数

$$u_{nl} = r R_{nl} \quad (12)$$

则其径向定态薛定谔方程可写为:

$$\left[-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V_{eff}(r) \right] u_{nl}(r) = E_i u_{nl}(r) \quad (13)$$

因为采用单电子近似, 使用下面的模型势:

$$V(r) = -(1 + a_1 e^{-a_2 r} + a_3 r e^{-a_4 r} + a_5 e^{-a_6 r})/r \quad (14)$$

参量 a_i 通过拟合由此式理论计算的束缚能与实验中得出的靶原子基态及前几个激发态的束缚能来确定^[12], 单原子有关参数可查看相关文献^[13].

(10)式中平面波项 $\exp(i\vec{q} \cdot \vec{r})$ 可用分波展开成如下形式:

$$\exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) = 4\pi \sum_{lm} i^l j_l(qr) Y_{lm}^*(\hat{q}) Y_{lm}(\hat{r}) \quad (15)$$

并且

$$\{\exp(i\vec{q} \cdot \vec{r})\}^* = 4\pi \sum_{lm} i^{-l} j_l(qr) Y_{lm}(\hat{q}) Y_{lm}^*(\hat{r}) \quad (16)$$

其中 $j_l(qr)$ 是球贝塞尔函数.

相互作用项可表示为:

$$r \cos \theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{10}(\hat{r}) \quad (17)$$

因此(10)中对空间变量的积分项即为:

$$\begin{aligned} \psi_0(\vec{q}) &= \int d\vec{r} \{ \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \} * r \cos \theta \Psi_0(\vec{r}) \\ &= 4\pi \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_{lm} i^{-l} Y_{lm}(\hat{q}) \int drr^3 R(r) j_l(qr) \\ &\quad \int d\vec{r} Y_{lm}^*(\hat{r}) Y_{10}(\hat{r}) Y_{l_0 m_0}(\hat{r}) \end{aligned} \quad (18)$$

这里基态波函数 $\psi_0(r) = R(r) Y_{l_0 m_0}(\hat{r})$. 计算上式时, 只考虑 $m = 0$, 且 $l = 1$. 因为线性极化的激光场中, $m = \pm 1$ 分量对电离几率的贡献相对于 $m = 0$ 而言可以忽略^[14].

上式中立体角积分结果为:

$$\begin{aligned} &\int d\vec{r} Y_{lm}^*(\hat{r}) Y_{10}(\hat{r}) Y_{l_0 m_0}(\hat{r}) \\ &= \left[\frac{3(2l_0 + 1)}{4\pi(2l + 1)} \right]^{1/2} C(1l_0 l; 0m_0 m) C(1l_0 l; 000) \end{aligned} \quad (19)$$

这里 $c's$ 是 Clebsch - Gordan 系数. 所以

$$\begin{aligned} f^{(1)}(\vec{p}) &= -i \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} dt E(t) \\ &\quad \exp[iS_p(t)] \exp(iI_p t) \times \psi_0(\vec{q}) \end{aligned} \quad (20)$$

下面计算二级强场近似, 其电离振幅是一个五重积分, 我们对动量为 \vec{k} 的中间态的积分采用鞍点近似^[15], 则有以下结果^[16]:

$$\begin{aligned} f_p^{(2)} &= - \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_t^{\infty} dt' \langle \chi_p(t') | \\ &\quad V \int d\vec{k} | \chi_k(t') \rangle \langle \chi_k(t) | H_i(t) | \Psi_0(t) \rangle \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_t^{\infty} dt' \int d\vec{k} \int d\vec{r}' \langle \chi_p(t') | V | \vec{r}' \rangle \\ &\quad \langle \vec{r}' | \chi_k(t') \rangle \langle \chi_k(t) | H_i(t) | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi_0(t) \rangle \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_t^{\infty} dt' \int d\vec{k} \times \int d\vec{r}' [\chi_p(\vec{r}', t')] * \\ &\quad V(r') \chi_k(\vec{r}', t') \times \int d\vec{r} [\chi_k(\vec{r}, t)] * \vec{r} \cdot \vec{E}(t) \Psi_0(\vec{r}, t) \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_t^{\infty} dt' \int d\vec{k} \exp \{ -i[S_k(t') - \\ &\quad S_p(t')] \} \exp[iS_k(t)] E(t) \exp(iI_p t) \times \\ &\quad \int d\vec{r}' \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(-i\vec{p} \cdot \vec{r}') V(r') \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}') \times \\ &\quad \int d\vec{r} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}) \exp[-i\vec{A}(t) \cdot \vec{r}] r \cos \theta \Psi_0(\vec{r}) \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_t^{\infty} dt' \int d\vec{k} \exp \{ -i[S_k(t') - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &S_p(t')] \} \exp[iS_k(t)] E(t) \exp(iI_p t) \times \\ &\quad \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r}' \exp[i(\vec{k} - \vec{p}) \cdot \vec{r}'] V(r') \times \\ &\quad \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{r} \exp(-i[\vec{k} + \vec{A}(t)] \cdot \vec{r}) r \cos \theta \Psi_0(\vec{r}) \\ &\quad (\text{注: 用 } t' = t - \tau \text{ 代换 } t) \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{t'}^{\infty} dt \int d\vec{k} \exp \{ -i[S_k(t) - \\ &\quad S_p(t)] \} \exp[iS_k(t')] E(t') \exp(iI_p t') \times \\ &\quad \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r}' \exp[i(\vec{k} - \vec{p}) \cdot \vec{r}'] V(r') \times \\ &\quad \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{r} \exp(-i[\vec{k} + \vec{A}(t')] \cdot \vec{r}) r \cos \theta \Psi_0(\vec{r}) \\ &\quad (\text{注: } \int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{t'}^{\infty} dt = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t dt') \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t dt' \int d\vec{k} \exp \{ -i[S_k(t) - \\ &\quad S_p(t)] \} \exp[iS_k(t')] E(t') \exp(iI_p t') \times \\ &\quad \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r}' \exp[i(\vec{k} - \vec{p}) \cdot \vec{r}'] V(r') \times \\ &\quad \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{r} \exp(-i[\vec{k} + \vec{A}(t')] \cdot \vec{r}) r \cos \theta \Psi_0(\vec{r}) \\ &\quad (\text{注: 鞍点近似中, } \vec{k}_s(t, \tau) = -\frac{1}{\tau} \int_{t-\tau}^t dt'' \vec{A}(t''), \text{ 又} \\ &\quad t' = t - \tau, \text{ 因此 } \int_{-\infty}^t dt' = - \int_{\infty}^0 d\tau = \int_0^{\infty} d\tau) \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_0^{\infty} d\tau \left(\frac{2\pi}{i\tau} \right)^{3/2} \exp \{ i[S_{k_s}(t) - \\ &\quad S_p(t)] \} \exp[iS_{k_s}(t')] E(t') \exp(iI_p t') \times \\ &\quad \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r}' \exp[i(\vec{k} - \vec{p}) \cdot \vec{r}'] V(r') \times \\ &\quad \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{r} \exp(-i[\vec{k} + \vec{A}(t)] \cdot \vec{r}) r \cos \theta \Psi_0(\vec{r}) \Big|_{k=k_s} \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t dt' \left[\frac{2\pi}{i(t-t')} \right]^{3/2} \exp \{ -i[S_{k_s}(t) - \\ &\quad S_p(t)] \} \exp[iS_{k_s}(t')] E(t') \exp(iI_p t') \times \\ &\quad \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r}' \exp[i(\vec{k} - \vec{p}) \cdot \vec{r}'] V(r') \times \\ &\quad \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\vec{r} \exp(-i[\vec{k} + \vec{A}(t')] \cdot \vec{r}) r \cos \theta \Psi_0(\vec{r}) \Big|_{k=k_s} \end{aligned} \quad (21)$$

上式中的有关物理量表达式如下:

$$S_p(t) = \frac{1}{2} \vec{A}(t') \int_{-\infty}^t dt' [\vec{p} + \vec{A}(t')]^2 \quad (22)$$

$$\vec{k}_s(t, \tau) = -\frac{1}{\tau} \int_{t-\tau}^t dt'' \vec{A}(t'') = -\frac{1}{t-t'} \int_{t'}^t dt'' \vec{A}(t'') \quad (23)$$

$$S_{k_s}(t) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^t dt'' [\vec{k}_s(t,t') + \vec{A}(t'')]^2$$
$$= \frac{1}{2} \int_{-\tau/2}^t dt'' [\vec{k}_s(t,t') + \vec{A}(t'')]^2 \quad (24)$$

对原子的模型势 $V(r)$ 做傅里叶变换, 通过运算能够得到:

$$V(k) = \int d\vec{r} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) V(r)$$
$$= -4\pi \left[Z \frac{1}{k^2} + a_1 \frac{1}{a_2^2 + k^2} + a_3 \frac{2a_4}{(a_2^2 + k^2)^2} + a_5 \frac{1}{a_6^2 + k^2} \right] \quad (25)$$

傅里叶变换形式中, 为了避免积分中存在的奇点, 实际数值计算中往往采用以下形式的势能:

$$\tilde{V}(r) = V(r)e^{-\alpha r} \quad (26)$$

其中 $e^{-\alpha r}$ 是衰减因子, 这种改变不会影响阈上电离谱的形状.

沿动量 \vec{p} 方向发射的动能为 $p^2/2$ 的电离电子, 其角分布或者动量分布为

$$\frac{d^3P}{d^3\vec{p}} = |f(\vec{p})|^2 \quad (27)$$

线性极化的激光场单原子组成的系统具有柱对称性, 光电子的两维动量谱写为:

$$\frac{d^2P}{dEd\theta} = 2\pi |f(p)|^2 p \sin\theta \quad (28)$$

其中 θ 是动量 \vec{p} 的方向和激光极化方向 \vec{z} 之间的夹角. 通过对 θ 积分, 可以得到整个空间光电子的能量谱:

$$\frac{dP}{dE} = 2\pi \int_0^\pi |f(\vec{p})|^2 \sqrt{2E} \sin\theta d\theta \quad (29)$$

在某个能量间隔(如从 E_1 到 E_2)内光电子的电离几率为

$$P = 2\pi \int_{E_1}^{E_2} dE \sqrt{2E} \int_0^\pi |f(\vec{p})|^2 \sin\theta d\theta \quad (30)$$

比如沿着与规定的激光极化轴正向夹角为 θ ($0^\circ < \theta < 180^\circ$) 的某一立体角内光电子的电离几率为

$$P_\Omega = 2\pi \int_{E_1}^{E_2} dE \sqrt{2E} \int_0^\theta |f(\vec{p})|^2 \sin\theta d\theta \quad (31)$$

至此得到利用强场近似原理描述的激光场中原子阈上电离的电离几率表示式.

3 总 结

强场近似理论是研究激光场中原子阈上电离性质的重要理论方法之一, 能基本准确地描述相应实验现象. 本文通过半经典理论模型^[17], 详尽

论述了强激光场中单个原子阈上电离的强场近似理论方法, 并表明电离光电子的动量分布以及电离几率. 二级强场近似方法能够分别描述低能光电子和高能光电子的发射行为, 能够很好地反映电离光电子的能谱结构, 能谱中高能平台的出现是由于电离电子与母核发生了重散射, 可以用二阶强场近似理论得到很好的解释. 文章为应用强场近似方法模拟研究激光场中单原子的动力学行为提供了一定的理论参考和依据.

参考文献:

[1] Maimann T H. Stimulated optical radiation in ruby [J]. *Nature*, 1960, 187: 493.

[2] Becker W, Grasbon F, Kopold R, *et al.*, Above - threshold ionization: from classical features to quantum effects [J]. *Rev. Mod. Phys.*, 2002, 48: 35.

[3] Fittinghoff D, Bolton P, Chang B, *et al.* Observation of nonsequential double ionization of helium with optical tunneling [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, 69: 2642.

[4] Keldysh L V. Ionization in the fields of a strong electromagnetic Wave [J]. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 1964, 47: 1945.

[5] Wu C Y, Yang Y D, Liu Y Q, *et al.* Characteristic spectrum of very low - energy photoelectron from above - threshold ionization in the tunneling regime [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2012, 109: 043001.

[6] Yurchenko S, Patchkovskii S, Litvinyuk I, *et al.* Laser - induced interference, focusing, and diffraction of rescattering molecular photoelectrons [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 93: 22

[7] Tong X M, Chu S I. Time - dependent density - functional theory for strong - field multiphoton processes: Application to the study of the role of dynamical electron correlation in multiple high - order harmonic generation [J]. *Phys. Rev. A*, 1998, 57: 452.

[8] Joachain C J, Kylstra N J, Potvliege R M. *Atoms in intense laser fields* [M]. New York: Cambridge Press, 2012.

[9] Madsen L B. Strong - field approximation for high - order harmonic generation in infrared laser pulses in the accelerated Kramers - Henneberger frame [J]. *Phys. Rev. A*, 2021, 104: 033117.

[10] Milosevic D B, Paulus G G, Bauer D, *et al.* Above - threshold ionization by few - cycle pulses [J]. *J. Phys. B*, 2006, 39: 203.

[11] Chen Z, Morishita T, Le A T, *et al.* Analysis of two - dimensional high - energy photoelectron momentum

- distributions in the single ionization of atoms by intense laser pulses[J]. *Phys. Rev. A*, 2007, 76: 043402.
- [12] Tong X M, Chu S I. Density – functional theory with optimized effective potential and self – interaction correction for ground states and autoionizing resonances[J]. *Phys. Rev. A*, 1997, 55: 3406.
- [13] Tong X M, Lin C D. Empirical formula for static field ionization rates of atoms and molecules by lasers in the barrier – suppression regime[J]. *J. Phys. B*, 2005, 38: 2593.
- [14] Chen Z, Morishita T, Le A T, *et al.* Analysis of two – dimensional photoelectron momentum spectra and the effect of the long – range Coulomb potential in singleionization of atoms by intense lasers [J]. *Phys. Rev. A*, 2006, 74: 053405.
- [15] Lewenstein M, Kulander K C, Schafer K J, *et al.* Rings in above – threshold ionization: a quasiclassical analysis[J]. *Phys. Rev. A*, 1995, 51: 1495.
- [16] Chen Z, Le A T, Morishita T, *et al.* Quantitative rescattering theory for laser – induced high – energy plateau photoelectron spectra[J]. *Phys. Rev. A*, 2009, 79: 033409.
- [17] Bransden B H, Joachain C J. *Physics of atoms and molecules* [M]. New York: Prentice – Hall, 2003.