

轨道电子的三重动量相关:氖原子的从头计算

胡 涸 丁 欣 王与焯 张贵忠 姚建铨

天津大学精密仪器与光电子工程学院光电信息技术教育部重点实验室, 天津 300072

摘要 通过求解密度泛函理论中的含时科恩-沈(TDKS)方程,对 Ne 原子光电离过程进行了数值模拟,发现了在高强度极紫外(XUV)激光脉冲作用下的三重动量相关(TMC)现象。计算结果显示了不同轨道电子具有不同电离特性,发现对于高强度 XUV 激光脉冲,Ne 原子 p 轨道电子的电离主要发生在沿着轨道纵向的方向上。通过计算各轨道电子的动量分量,发现轨道电子的平行动量相互关联,垂直动量也相互关联,但平行动量和垂直动量之间并不关联。这些相互关联的关系可以由轨道形状、轨道朝向和激光偏振来解释。模拟结果显示了内层轨道电子也可以发生显著电离现象。

关键词 物理光学; 光致电离; 三重动量相关; 含时密度泛函; 极紫外激光

中图分类号 O562 **文献标识码** A

doi: 10.3788/LOP53.062601

Triple-Momentum-Correlation of Orbital Electrons: Ab Initio Experiment on Ne Atom

Hu Tian Ding Xin Wang Yuye Zhang Guizhong Yao Jianquan

Key Laboratory of Optoelectronic Information Technology, Ministry of Education,

College of Precision Instrument and Optoelectronics Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China

Abstract By deploying the time-dependent Kohn-Sham (TDKS) scheme of the density functional theory, numerical simulations are performed on the photoionization of Ne atom and a triple-momentum-correlation (TMC) affected by intense extreme ultra-violet (XUV) laser pulses is found. The simulation results show the different characteristics of ionization from different orbital electrons. For strong XUV laser intensity, ionization undergoes mainly along the orbital direction (longitudinal direction) for the p-type orbits in Ne atom. By simulating the momenta components of different orbital electrons, it is unveiled that the parallel momenta of the orbital electrons are mutually correlated, and the perpendicular momenta are also mutually correlated, but not between them. These correlation relations are deciphered in the interplay between the orbital geometry, orbital orientation and laser polarization. The simulation results also show a profound ionization of the inner orbital electrons.

Key words physical optics; photoionization; triple-momentum-correlation; time-dependent density function; extreme ultra-violet laser

OCIS codes 260.5210; 020.5580; 260.7200; 020.2649

1 引 言

自从 20 世纪 80 年代超短激光脉冲在实验室问世以来,强激光脉冲与原子和分子之间的相互作用就成为了研究热点。除了实验测量和理论推导,数值模拟也在该研究领域扮演着越来越重要的角色。为了处理三维多电子体系,密度泛函理论^[1-4]被不断发展和完善,已成为不可替代的工具。在交换关联(XC)势^[1]选择合理的前提下,含时科恩-沈(TDKS)理论的数值计算方法具有稳健性和精确性,因而成为从头计算方法

收稿日期: 2015-12-28; **收到修改稿日期:** 2015-01-28; **网络出版日期:** 2016-05-31

基金项目: 国家 973 计划(2015CB755403)、国家自然科学基金(61178028)

作者简介: 胡 涸(1991—),男,硕士研究生,主要从事激光与多电子体系作用方面的研究。E-mail: hutian@tju.edu.cn

导师简介: 张贵忠(1963—),男,教授,博士生导师,主要从事光电子技术和强光与物质相互作用等方面的研究。

E-mail: johngzhang@tju.edu.cn

中应用最广泛的理论。LB α 势^[3,5]是对传统 XC 势在长程处的修正,被证明可以用来研究在极紫外(XUV)甚至是 X 射线频谱区的激光脉冲对原子和分子的电离^[3,6],因而这种自相互作用修正势在该领域具有较强适用性。

原子和分子内轨道的行为及其动力学机制是目前在原子、分子和光学物理(AMO)领域的研究重点之一,最近研究发现内轨道的行为对实验中的观测量[包括电离率、高次谐波产生(HHG)等]有很大贡献^[8-10]。而这些观测量以前都被认为是源自外层轨道。通常情况下,原子和分子的电离和解离研究^[11-13]所使用的激励光是 800 nm 左右波长的红外激光脉冲。其激光脉冲单光子能量为 1.55 eV,比大多数原子的电离势低。随着 XUV 光源逐步成为切实可用的光源^[14],利用这些光源进行电离的研究将变得可行。例如最近,XUV 激光脉冲被用来研究双电子出射,并发现了 Ne 原子中的量子拍现象^[15]。由于 XUV 激光脉冲的单光子能量超过绝大多数原子的电离势,相比于传统的 800 nm 波长激光诱导的电离,可以预期到会发生不同以往的电离过程。

本文重点研究了在 XUV 脉冲作用下,源自 Ne 原子不同轨道的电子电离行为、动力学机制以及这些电子之间的相关性。数值计算结果显示,原子内轨道电子也可以被强 XUV 激光脉冲显著电离。在轨道形状、轨道朝向和激光偏振方向条件适当的前提下,来自不同轨道的电子在出射过程中表现出明显的动量相关性。

2 理论和计算

对强 XUV 激光脉冲电离 Ne 原子的动态过程进行了数值研究。在密度泛函理论的基础上,利用了 TDKS 方程模拟科恩-沈(KS)轨道及其时空演化过程。外层轨道能量被作为原子的电离势。初态轨道波函数的时间演化是在包含了 XUV 激光作用的有效势下进行的。诸如电子数量、电子坐标和电子动量等物理量都是含时演算的。

TDKS 理论中,电子轨道 ψ_i 的基本方程就是 TDKS 方程:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi_i(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + \nu_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t) \right] \psi_i(\mathbf{r}, t), i = 1, 2, \dots, N, \quad (1)$$

$$\nu_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t) = \nu_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) + \nu_{\text{H}}(\mathbf{r}, t) + \nu_{\text{xc}}(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

式中 \mathbf{r} 为电子的三维坐标向量, ν_{ext} 为外场与电子的偶极相互作用项, ν_{H} 为库仑势(包括电子之间及电子与原子核间的相互作用), ν_{xc} 为 XC 势, ∇ 表示哈密顿算符, ν_{eff} ^[1,3] 为有效势。除非特殊说明,一律使用原子单位。总的电子密度与轨道的关系为:

$$n(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (3)$$

在密度泛函理论的计算中,XC 势的选取是关键。由于前人的研究,已有高质量的 XC 势可供选取。传统 XC 势如局域自旋密度近似(LSDA)和广义梯度近似(GGA)包含了非真实的自相互作用能量,并且无法准确描述电子的长程库仑渐进行为[$\nu_{\text{xc}}(\mathbf{r}) \rightarrow -1/r, \mathbf{r} \rightarrow \infty$]。因此,计算中引入能消除自相互作用能量并考虑了长程库仑势的 LB α 势能项。由于 XUV 的单光子能量就能够使 Ne 原子的电子直接电离到连续态,所以选择此 XC 势很有必要,LB α 势能项的表达式为:

$$\nu_{\text{xc}}^{\text{LB}\alpha}(\alpha, \beta; \mathbf{r}) = \alpha \nu_x^{\text{LDA}}(\mathbf{r}) + \nu_c^{\text{LDA}}(\mathbf{r}) - \frac{\beta x^2(\mathbf{r}) n^{1/3}(\mathbf{r})}{1 + 3\beta x(\mathbf{r}) \ln\{x(\mathbf{r}) + [x^2(\mathbf{r}) + 1]^{1/2}\}}, \quad (4)$$

式中,前两项分别表示局域密度近似(LDA)下的交换能和相关能,第三项为梯度修正项,参数 $\alpha = 1.19$, $\beta = 0.01$, $x(\mathbf{r}) = |\nabla n(\mathbf{r})| [n(\mathbf{r})]^{-4/3}$ 。

采用的 XUV 激光脉冲是线偏振的,并且使用高斯包络,其表达式为:

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{e} I_0 \exp(-t^2/\tau^2) \cos(\omega t), \quad (5)$$

式中 \mathbf{e} 为表示电场方向的单位矢量,强度 I_0 取值范围是 0.01~0.8,载波频率 ω 取值范围是 15~35 eV,脉宽 τ 保持恒定为 0.5 fs。哈密顿算符中 XUV 脉冲与电子之间的偶极相互作用项为:

$$\nu_{\text{ext}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r}. \quad (6)$$

对于 Ne 原子,其电子分布在闭壳层,所有的 10 个电子将组成 5 个空间轨道。所以(1)式和(3)式中的数字

N 的值为 5。通过计算得出 $1s$ 轨道能量 (-32.7 a.u.) 比使用的 XUV 光子能量大得多, 对电离过程几乎无影响, 因此对电离过程的模拟计算限定在 Ne 原子的其他 4 个 KS 轨道上: $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ 。通过将这 4 个轨道的时变波函数投影到相应的初态波函数上^[16-18], 可得到各轨道的占据电子数量:

$$P_i(t) = |\langle \phi_i(0) | \phi_i(t) \rangle|^2, \quad (7)$$

在每一步的时间演化过程中, 使用边界吸收函数来避免在计算网格边界的反射效应。所采用的边界吸收函数的一维表达式为:

$$M(z) = [1 + \exp(|z| - 0.9 \cdot z_{\max})]^{-1}. \quad (8)$$

为了保证数值计算的精度, 对计算模拟的空间大小和节点数量翻倍后进行了再次计算, 得到的结果与先前的一致。为了处理 v_H 势能项, 所有的计算指令都是在并行算法下进行的。

3 结果和讨论

通过 TDKS 理论获得的 Ne 原子^[19-24] 的 4 个轨道如图 1 所示。 $1s$ 轨道是球对称的, 密集地环绕在核的四周, 因此没有展示出来。图 1 中红色和蓝色分别表示波函数的值为 $+0.1$ 和 -0.1 。 p 轨道的节点处于笛卡尔坐标的原点。从图 1 可以看出 3 个 p 轨道形状完全相同。这 4 个轨道就是数值模拟的初态波函数。计算所得的 $2s$ 和 $2p$ 轨道的能量分别为 -1.78 a.u. 和 -0.79 a.u. (实验值为 -1.65 a.u. 和 -0.79 a.u.^[24])。

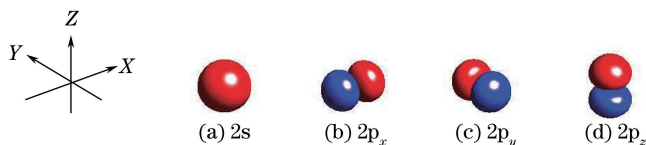


图 1 Ne 原子 4 个初始轨道的等值面图

Fig. 1 Iso-surface images of four initial orbits of Ne

4 个轨道的电子数量随着时间的演变过程如图 2 所示。图 2(a) 给出了电子数量在 XUV 脉冲参数为: 强度 0.01 a.u. (3.54×10^{14} W/cm²), 脉宽 0.5 fs, 载波频率 15 eV 的情况下随时间的变化关系。因为光电离的发生需要足够的光子能量, 而脉冲宽度与脉冲强度的乘积正比于脉冲能量。因此, 图 2(a) 显示电子总量

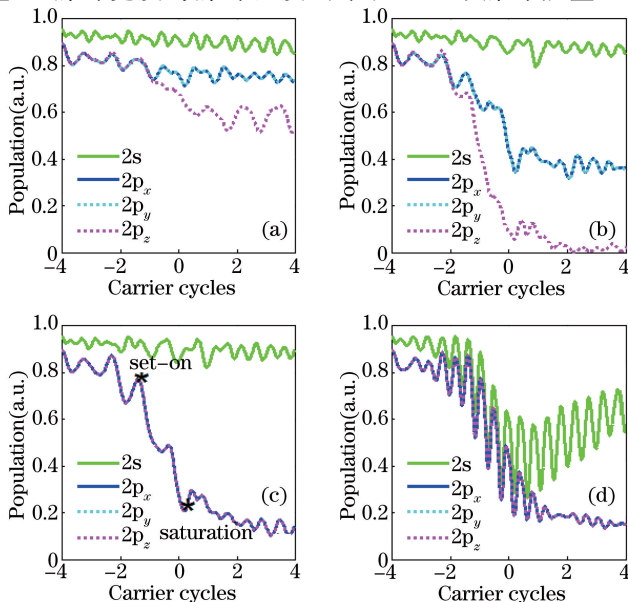


图 2 4 个轨道电子数量随时间的演化过程。(a) 脉冲强度为 0.01 a.u.; (b) 脉冲强度为 0.1 a.u.;

(c) 激光偏振方向沿着第一象限的对角线方向; (d) 激光偏振方向沿着第一象限的对角线方向, 载波频率为 35 eV

Fig. 2 Populations of the four orbital electrons change with temporal variations. (a) Intensity is 0.01 a.u.; (b) intensity is 0.1 a.u.; (c) laser polarization along with first octant diagonal; (d) laser polarization along with first octant diagonal, and carrier frequency is 35 eV

随时间只有微弱减少,可以归因于使用的 XUV 脉冲强度过低。按照此推断,脉冲强度越高,脉冲结束后剩下的电子数量会越少,图 2(b)正好说明了这点。图 2 中的电子数量变化曲线中的调制结构在相关研究中频繁出现^[25]。因为 2s 轨道的能量比 XUV 光子能量(15 eV, 0.55 a.u.)要高,2s 轨道的电子不会被显著电离。如果只将 XUV 脉冲的强度提高到 0.8 a.u.,而不改变脉宽和载波频率,同样无法使 2s 轨道的电子数量明显减少。

光场沿 $2p_z$ 轨道方向(z 轴)偏振的情况下得到的结果如图 2(a)和(b)所示。该条件下 $2p_x$ 和 $2p_y$ 轨道是等价的,因此他们的电离显示出同样的规律。作为对比, XUV 激光场的偏振方向沿第一象限的对角线方向($x=y=z$ 方向)的结果如图 2(c)和(d)所示,即光场在 x 轴, y 轴和 z 轴上有相同分量。此时 3 个 p 轨道在这种情况下是等价的,因此他们的电子数量有相同的随时间变化曲线。在图 2(c)中,靠上的星号表示电离过程开始的时刻,靠下的星号表示电离饱和的时刻。定义电离阶段为从标出的电离开始时刻到电离饱和时刻之间的时间段,电离完成阶段为从电离饱和时刻到脉冲结束时刻之间的时间段。从图 2(d)中可以看出 2s 轨道在载波频率为 35 eV 的情况下发生显著电离,由此可看出激光光子的能量增加是 2s 轨道电离的原因。

图 3 显示了 4 个轨道电子的笛卡尔坐标期望值随时间的变化。此时的 XUV 脉冲是沿着第一象限对角线方向偏振的,激光场在 3 个坐标轴上有相同的分量,3 个 p 轨道等价,其中光强为 0.1 a.u.,脉冲宽度为 0.5 fs,载波频率 15 eV。图 3(a)显示了 $2p_x$ 轨道电子的 3 个坐标随时间的变化。该轨道沿着 x 轴方向(下面所指的纵向)并且在电离过程中相应的 x 坐标比 y 和 z 坐标有更大的偏移量。图 3(b)和(c)可以进行类似的分析。图 3(d)所示的是 2s 轨道,他的球对称性使得其 3 个坐标分量相互等价,因此该轨道电子的 3 个坐标分量对于平衡位置的偏移量是一样的。在 XUV 光子能量低于 2s 轨道能量时,2s 轨道的电离与其他 3 个 p 轨道的电离相比明显要弱(如图 2 所示)。大量关于光电离的研究都发现了电离电子的位移现象^[26-27],并把这些位移现象作为电离的特征表现。从根本上说,足够的电子位移就意味着电离。从以上的讨论中可以推断,对于高强度的 XUV 脉冲,Ne 原子的 p 轨道的电离主要是沿着轨道方向(纵向)进行的。

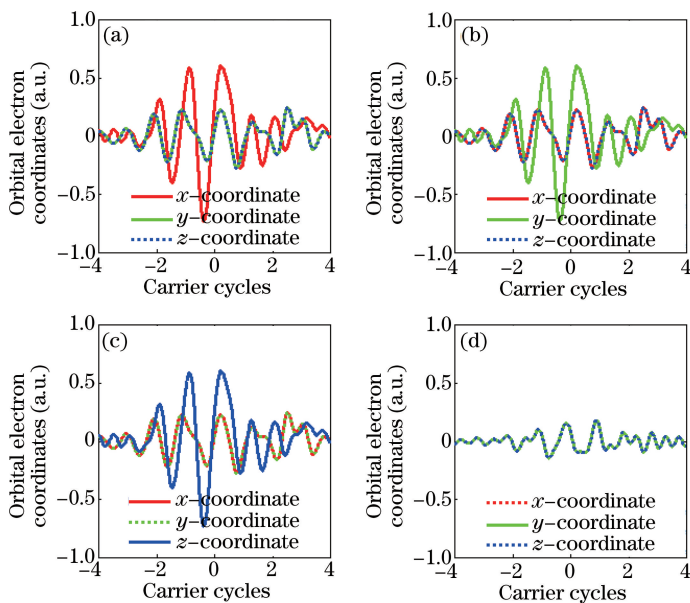


图 3 轨道电子的笛卡尔坐标随时间的变化。

(a) $2p_x$; (b) $2p_y$; (c) $2p_z$; (d) 2s

Fig. 3 Cartesian coordinates of orbital electrons change with temporal variations.

(a) $2p_x$; (b) $2p_y$; (c) $2p_z$; (d) 2s

在电离过程中,动量是一个很重要的观测量,包含着电离过程中轨道电子的丰富信息。为了探索动量相关性^[19,22,28],计算不同轨道电子的动量。典型的三重动量相关性(TMC)如图 4 所示,其中激光场的偏振方向沿着第一象限的对角线($x=y=z$ 方向)。XUV 脉冲参数设置为:光强 0.1 a.u.,脉宽 0.5 fs,载波频率 15 eV。动量值分别从电离阶段和电离完成阶段[如图 2(c)所示]的计算结果中选取,代表了轨道电子在不同

时刻的动态动量。

传统的双动量相关性绘制在垂直于笛卡尔坐标轴的平面上, TMC 在坐标平面上的投影。红色代表电离阶段的动量, 绿色代表电离完成后的动量[如图 2(c) 所示]。从图 4 可以看出, 沿着纵向(平行于轨道方向)的或者横向(垂直于轨道方向)的动量分量是相关的, 但是这两个方向的动量分量之间没有相关性。例如, $2p_x$ 、 $2p_y$ 和 $2p_z$ 轨道的纵向动量是互相关联的, 将这些动量表示为 P_L 。对于 $2p_x$ 轨道, 相关的动量成份是沿着 x 轴的, 对于 $2p_y$ 轨道和 $2p_z$ 轨道, 相关的动量成份分别沿着 y 轴和 z 轴。图 4(b) 和 (d) 中, 横向动量分量也显示出相关性, 将这些动量表示成 P_T 。 P_T 的方向包含了两种可能性, 对于 $2p_z$ 轨道的 P_T 既可以是 P_x 也可以是 P_y 。对于载波频率为 35 eV 的 XUV 脉冲, 这时光子能量高于所有 3 个 p 轨道的能量, 动量相关性保持不变。为了研究 XC 势对相关性的影响, 在图 4(c) 和 (d) 中把总势能中的 XC 势人为设置成 0, 从图 4(c) 和 (d) 中可以看出动量值有所减小并且向第一象限偏移。由于 XC 势在总势能中只占很小的比例, 而取消 XC 势能项能使动量值有明显变化, 因此可以推断 XC 势对动量相关性具有一定影响。近年来关于其他原子电离研究工作^[29-30]研究了电子动量角分布, 但是对于电离电子来源于哪个轨道并没有研究。值得注意的是, 在这里讨论的是轨道电子, 也就是, 不仅研究电离电子的 TMC, 还对他们源自哪个轨道进行区分。在计算结果中, 没有发现 2s 轨道和任何一个 p 轨道的相关性, 因为 2s 轨道的形状与 p 轨道的形状(如图 1 所示)是完全不同的。相关性信息的发现可能对区分光电离中的电子来源或者轨道成像^[31]具有参考价值。

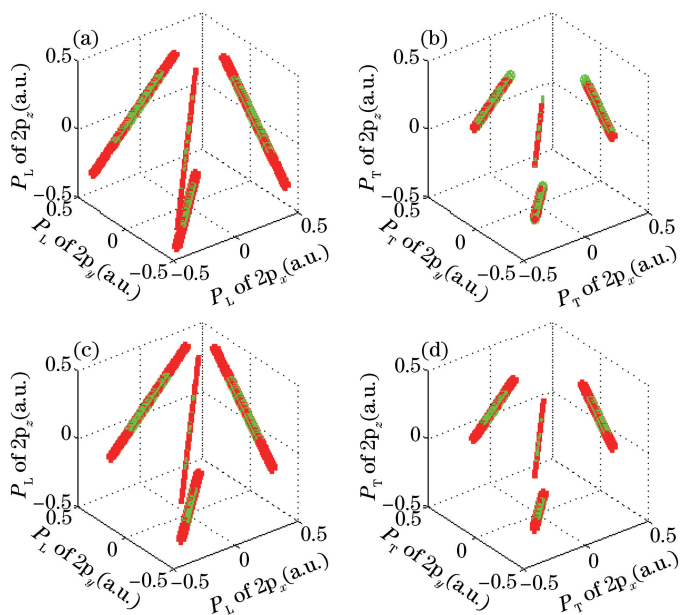


图 4 $2p_x$ 、 $2p_y$ 和 $2p_z$ 轨道电子的 TMC。(a) P_L , 有 XC 势; (b) P_T , 有 XC 势; (c) P_L , 没有 XC 势; (d) P_T , 没有 XC 势

Fig. 4 TMC plots of the $2p_x$, $2p_y$ and $2p_z$ orbital electrons. (a) P_L , XC-on; (b) P_T , XC-on;

(c) P_L , XC-off; (d) P_T , XC-off

为探讨 2p 轨道能在电离过程中保持 TMC 的原因, 计算 2p 和 2s 轨道 Keldysh 参数 $\gamma = \frac{\omega \sqrt{2I_p}}{I_0}$, 其中 I_p 为电离势, ω 为载波圆频率, I_0 为激光的电场强度。当 $\gamma \gg 1$ 时, 电离过程属于多光子电离, 当 $\gamma \ll 1$ 时电离属于隧穿电离, 此过程可用绝热过程描述。对于 2p 轨道电离, 光强为 0.1 a.u. 且载波频率 15 eV 时, 计算得 $\gamma \approx 2.2$ 。而对于 2s 轨道, $\gamma \approx 7.7$ 。因此计算的电离过程即非多光子电离也不是隧穿电离, 而属于两者之间。文献[32]用非绝热隧穿电离来描述该电离过程。在此过程中, 电子在电离前能量不断增加, 使电离出口不断靠近原子核, 从而增大电离概率, 最终发生电离。与绝热隧穿电离不同的是, 该过程中电子能量在电离过程中不守恒, γ 值越大, 电子电离时的动能变化越明显。在 2p 轨道电离时, 由于 γ 值较小, 电离过程仍近似于绝热隧穿电离, 电子动能变化不大, 同时激光电场在 3 个 2p 轨道纵向(或横向)上有相同分量, 各纵向(或横向)动量分量能在相同势能面下进行稳定演变, 因而可以保持 TMC。而对于 2s 轨道的电子, 其电子能量在该过程因非绝热效应产生较大变化, 因而模拟结果中也没有发现该轨道电子的动量相关性。

为了进一步研究 TMC 的机制,计算电离电子感受到随时间演变的动态势能面(PES)。因为 TDKS 方程中的有效势中包含了 XC 势,PES 显然依赖电子状态并且在不同时刻也不相同。(2)式给出了轨道电子感受到的有效势的表达,可以看出当 XUV 脉冲是沿第一象限的对角线偏振时, $2p_x$ 、 $2p_y$ 和 $2p_z$ 轨道的有效势是一样的。与图 4(a)对应,其 PES 图像如图 5 所示,图 5 中品红色所示的是轨道电子密度分布的等值线,所有的这些图形对应的都是电离饱和的时刻[如图 2(c)所示]。因为 XUV 脉冲是沿第一象限的对角线偏振的,所以 PES 也是朝此方向倾斜的。通过观察图 5 中的电子密度分布和 PES,能够进一步理解轨道形状对 TMC 的影响:对于 $x-z$ 截面,在 3 幅图中有相同的 PES,而电子密度的等值线却都不相同。其中图 5(a)和图 5(c)的等值线互为镜像对称,这是由于 $x-z$ 截面都沿着这两个轨道的纵向(P_L 方向),只是朝向不同,而对于 $2p_y$ 轨道却是横向(P_T 方向),因此图 5(b)中的等值线完全不同。这显示了不同轨道电子间的关联性与轨道形状、轨道朝向以及激光偏振方向的密切关系。

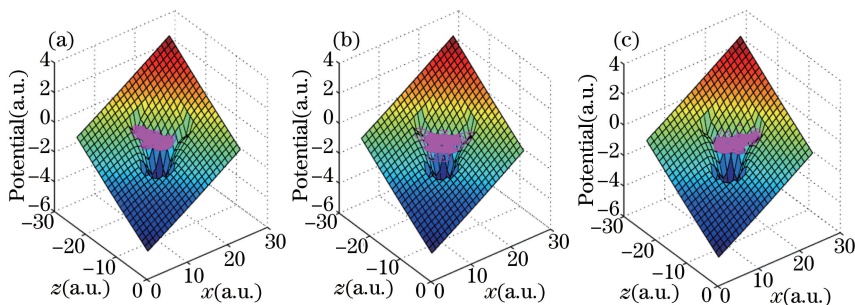


图 5 电离饱和时刻动态 PES 的三维图形和轨道电子的密度分布等值线。(a) $2p_x$ -L; (b) $2p_y$ -T; (c) $2p_z$ -L

Fig. 5 Three-dimensional tomographical snapshots of dynamic PES and orbital electrons population contours at ionization saturation instant. (a) $2p_x$ -L; (b) $2p_y$ -T; (c) $2p_z$ -L

4 结 论

通过求解 TDKS 方程,对 XUV 激光脉冲电离氖原子的过程进行了详尽的模拟研究。模拟结果显示,只要 XUV 激光脉冲光子能量足够高, $2s$ 轨道也可以发生显著电离。外层 p 型轨道电子的电离率受到轨道朝向与激光偏振方向的影响,电离主要发生在沿着轨道纵向的方向上。同时,通过计算不同电离阶段的电子动量绘制了三维动量相关图,揭示了 p 型轨道电子动态的 TMC,即 3 个 p 型轨道电子沿着纵向的或者横向的动量分量是相关的,但是这两个方向之间没有相关性。这种相关性与轨道形状、朝向和激光偏振方向有着密切关系。

参 考 文 献

- Parr R G, Yang W. Density-functional theory of atoms and molecules[M]. Oxford: Oxford University Press, 1989.
- Marques M A L, Maitra N T, Nogueira F M S, *et al.*. Fundamentals of time-dependent density functional theory[M]. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2012.
- Marques M A L, Ullrich C, Nogueira F, *et al.*. Time-dependent density functional theory[M]. Berlin: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
- Kohn W, Sham L J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects[J]. Physical Review, 1965, 140 (4A): A1133-A1138.
- Maitra N T, Faassen Mvan. Improved exchange-correlation potential for polarizability and dissociation in density functional theory[J]. The Journal of Chemical Physics, 2007, 126(19): 191106.
- Heslar J, Telnov D A, Chu S I. Time-dependent density-functional theory with optimized effective potential and self-interaction correction and derivative discontinuity for the treatment of double ionization of He and Be atoms in intense laser fields[J]. Physical Review A, 2013, 87(5): 052513.
- R van Leeuwen, E J Baerends. Exchange-correlation potential with correct asymptotic behavior[J]. Physical Review A, 1994, 49(4): 2421-2431.

- 8 Rey H F, Hart H W van der. Probing spin-orbit-interaction-induced electron dynamics in the carbon atom by multiphoton ionization[J]. *Physical Review A*, 2014, 90(3): 033402.
- 9 Penka E F, Couture-Bienvenue E, Bandrauk A D. Ionization and harmonic generation in CO and H₂CO and their cations with ultrashort intense laser pulses with time-dependent density-functional theory[J]. *Physical Review A*, 2014, 89(2): 023414.
- 10 Chen H, Tagliamonti V, Gibson G N. Enhanced ionization of an inner orbital of I₂ by strong laser fields[J]. *Physical Review A*, 2012, 86(5): 051403.
- 11 Yu Benhai, Li Yingbin, Li Fangtao. Nonsequential double ionization of Xe atoms by elliptically polarized few-cycle laser pulses[J]. *Acta Optica Sinica*, 2013, 33(6): 0602001.
余本海, 李盈宾, 李方涛. 少光周期的椭圆偏振激光脉冲驱动的氙原子非次序双电离[J]. *光学学报*, 2013, 33(6): 0602001.
- 12 Ma Xuewei, Ma Xiaodong, Dai Changjian. Electric field ionization of lithium atom[J]. *Acta Optica Sinica*, 2015, 35(6): 0602004.
马学伟, 马小东, 戴长建. 锂原子的光激发和电场电离[J]. *光学学报*, 2015, 35(6): 0602004.
- 13 Jia X Y, Hao X L, Fan D H, *et al.*. S-matrix and semiclassical study of electron-electron correlation in strong-field nonsequential double ionization of Ne[J]. *Physical Review A*, 2013, 88(3): 033402.
- 14 Zhao Z X, Chang Z, Tong X M, *et al.*. Circularly-polarized laser-assisted photoionization spectra of argon for attosecond pulse measurements[J]. *Optics Express*, 2005, 13(6): 1966-1977.
- 15 Nikolopoulos L A A. Time-dependent theory of angular correlations in sequential double ionization[J]. *Physical Review Letters*, 2013, 111(9): 093001.
- 16 Bandrauk A D, Shen H. Exponential split operator methods for solving coupled time-dependent Schrödinger equations[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1993, 99(2): 1185-1193.
- 17 Taira T, Furutani H, Guo C, *et al.*. Focus issue introduction: Laser ignition conference[J]. *Optics Express*, 2014, 22(S2): A564-A566.
- 18 Zhao K, Zhang G, Hill W T. Image labeling: A graphical interface to correlation in multiparticle ejection dynamics[J]. *Optics Express*, 2001, 9(1): 42-48.
- 19 Sun X, Li M, Yu J, *et al.*. Calibration of the initial longitudinal momentum spread of tunneling ionization[J]. *Physical Review A*, 2014, 89(4): 045402.
- 20 Hart H W van der, Morgan R. Population trapping in bound states during IR-assisted ultrafast photoionization of Ne⁺[J]. *Physical Review A*, 2014, 90(1): 013424.
- 21 Ishikawa K L, Kazansky A K, Kabachnik N M, *et al.*. Theoretical study of pulse delay effects in the photoelectron angular distribution of near-threshold EUV+ IR two-photon ionization of atoms[J]. *Physical Review A*, 2014, 90(2): 023408.
- 22 Kheifets A S, Ivanov I A. Transverse-electron-momentum distribution in pump-probe sequential double ionization[J]. *Physical Review A*, 2014, 90(3): 033404.
- 23 Tolstikhina I Y, Morishita T, Tolstikhin O I. Application of the many-electron weak-field asymptotic theory of tunneling ionization to atoms[J]. *Physical Review A*, 2014, 90(5): 053413.
- 24 Zhao Q, Morrison R C, Parr R G. From electron densities to Kohn-Sham kinetic energies, orbital energies, exchange-correlation potentials, and exchange-correlation energies[J]. *Physical Review A*, 1994, 50(3): 2138.
- 25 Kornev A S, Zon B A. Keldysh theory of tunnel ionization of an atom in a few-cycle laser pulse field[J]. *Physical Review A*, 2012, 85(3): 035402.
- 26 Becker W, Liu X J, Ho P J, *et al.*. Theories of photoelectron correlation in laser-driven multiple atomic ionization[J]. *Reviews of Modern Physics*, 2012, 84(3): 1011.
- 27 Peters M, Nguyen-Dang T T, Charron E, *et al.*. Laser-induced electron diffraction: A tool for molecular orbital imaging[J]. *Physical Review A*, 2012, 85(5): 053417.
- 28 Sun X, Li M, Ye D, *et al.*. Mechanisms of strong-field double ionization of Xe[J]. *Physical Review Letters*, 2014, 113(10): 103001.
- 29 Palacios A, Rescigno T N, McCurdy C W. Two-electron time-delay interference in atomic double ionization by attosecond

- pulses[J]. Physical Review Letters, 2009, 103(25): 253001.
- 30 Dong Cheng, Shen Li, Yang Jinhong, *et al.*. Angular distribution of ejected electrons from Eu $4f^7 6p_{1/2} 8s$ auto-ionizing state studied by velocity mapping imaging technique[J]. Acta Optica Sinica, 2014, 34(7): 0702001.
董程, 沈礼, 杨金红, 等. 用速度影像法研究 Eu 原子 $4f^7 6p_{1/2} 8s$ 自电离态的弹射电子角分布[J]. 光学学报, 2014, 34(7): 0702001.
- 31 Zwan E V van der, Lein M. Molecular imaging using high-order harmonic generation and above-threshold ionization[J]. Physical Review Letters, 2012, 108(4): 043004.
- 32 Klaiber M, Hatsagortsyan K Z, Keitel C H. Tunneling dynamics in multiphoton ionization and attoclock calibration[J]. Physical Review Letters, 2015, 114(8): 083001.