文章编号:0253-2239(2001)10-1157-04

飞秒强激光作用下 Ar 原子团簇离子能谱计算*

朱频频 黎 忠 刘建胜 徐至展

(中国科学院上海光学精密机械研究所强光光学开放研究实验室,上海 201800)

摘要: 研究了飞秒强激光与 Ar 原子团簇相互作用时的电离机制及库仑爆炸过程,建立了一个简化的模型计算相 互作用产生的离子能谱。计算结果与实验结果较为吻合,可以较好地解释离子能谱高能端的主要特征。 关键词: 飞秒激光;团簇;隧道电离;库仑爆炸 中图分类号:O437 文献标识码:A

1 引 言

近几年,强激光与团簇的相互作用成为一个十 分活跃的研究领域。许多实验观察到了强激光与大 尺寸原子团簇相互作用产生的能量超过 2 keV 的超 热电子^[1]和能量高达 1 MeV 的离子^[2],以及达到千 电子伏特量级的强烈的 X 射线辐射^[3,4],这些实验 现象表明团簇对激光能量有很高的吸收效率。这是 因为团簇虽然在宏观上是气体,但在局部却有类似 固体的高密度,而且由于团簇尺寸远小于激光波长, 近似认为团簇内的每个原子都感受到没有被屏蔽的 激光场强,因而大大增强了与激光的耦合效率,使其 对激光能量的吸收效率达到、甚至超过固体。在最 新的研究中,Ditmire 等人在 D₂ 团簇与 100 mJ 输出 能量的激光器产生的飞秒激光脉冲相互作用中产生 了大量的中子^[5],实现了"台式聚变"。

研究人员从不同角度建立了几种理论模型来描述团簇与强激光的相互作用过程,并试图解释实验中观察到的现象。McPherson等人^[6]认为在团簇与激光的相互作用过程中外壳层电子的集体激发造成了内壳层的空缺,从而产生了空心原子,并进而解释了他们在实验中观察到的原子内壳层 X 射线辐射的现象^[4]。Rose-Petruck等人^[7]提出了"电离点火" 模型,认为激光场与离子场的共同作用导致了团簇的高速电离,从而产生高电离态的离子。他们采用 蒙特卡罗方法模拟团簇在激光场中的运动,解释了 相互作用中高电离态离子以及高强度 X 射线辐射 的形成机制。Ditmire 等人^[8]提出了"流体动力学" 模型,他们把团簇近似看作是一个高密度的等离子 小球,每个原子感受到的电场是等离子球极化产生 的屏蔽场,原子的电离机制主要是在屏蔽场作用下 的隧道电离和电子碰撞电离,团簇通过逆韧致吸收 被加热,并伴随着流体动力学膨胀和库仑爆炸。这 个模型较好地解释了团簇的膨胀过程、团簇的共振 吸收效应、高电离态离子以及高能离子的产生等实 验现象。这三种模型从不同的角度研究了强光场下 原子团簇这一复杂的体系,能较好地解释部分相关 实验的结果,但它们有各自的特点和适用范围,并不 是很成熟和完全的理论。

与这些模型不同,本文将建立一个简单的模型 来分析Ar原子团簇在飞秒强激光场中的电离和离 子能量的获得过程,最后得到一个与我们的实验结 果符合较好的离子能谱。

2 理论模型

Ar 原子团簇与强激光相互作用时,团簇中的 Ar 原子在强激光场的作用下发生场电离。电离产 生的电子究竟是飞离团簇还是被束缚在团簇内,这 对整个作用体系的下一步行为起着至关重要的影 响。Last 等人^[9]对 Xe₁₁₀₀ 在强激光场(10¹⁶ W/cm²) 下的电离进行了研究,采用一维的近似方法跟踪了 团簇电离后单个电子在混合场(激光场与离子形成 的场的共同作用效果)下的运动轨迹,发现大多数的 电子在一个光周期的极短时间内就脱离了团簇。而 在目前大多数实验中,激光脉冲宽度在数十飞秒量 级,一个光周期只有几个飞秒甚至更短,因此我们可 以近似地认为电子刚被电离就飞离了团簇。这样,

^{*} 国家自然科学基金(29890210)、国家9732项目、国家攀登计划预选项目、九五院重大项目资助课题。

收稿日期 2000-07-21; 收到修改稿日期 2000-12-28

电子碰撞电离的效果就可以忽略,即认为团簇中 Ar 原子的电离机制主要是场电离。另外,电子飞离团 簇后,这时的团簇可以看成是一个平均电荷态为 q 的'离子球"。这个"离子球"随即发生库仑爆炸,把 它具有的电势能全部转化为离子的动能,而不同价 态的离子获得的能量并不相同,因此离子的能量有 一定的分布,从而形成离子能谱。

下面对各个过程进行详细讨论。

2.1 团簇内原子在强激光场中的电离

由于忽略了电子碰撞电离,因此 Ar 原子的电 离机制主要是场电离。对于实验常采用的 800 nm 的钛宝石激光,其趋肤深度 $\delta = 27.0$ nm,而对于 $5 \times 10^4 \uparrow$ Ar 原子的大团簇,其半径仅为 13.4 nm, 远小于 δ 因此我们可以认为每个 Ar 原子均受到没 有屏蔽的强激光场的作用。实验中一般采用的激光 功率密度 $I \ge 10^{16}$ W/cm², $\lambda = 0.8 \mu$ m,在这种量级 激光的作用下 Ar 原子一般只能电离到 Ar⁸⁺,因此 Arⁿ⁺的电离势 $E \le 143.458$ eV(Ar⁸⁺的电离势),则 凯尔迪什(Keldysh)常数

$$\gamma = \sqrt{rac{E}{2 imes 9.33 imes 10^{-14} \, I\lambda^2}} \leqslant 0.347 \ll 1$$
 ,

所以电离属于隧道电离。我们采用 ADK 模型的隧 道电离公式¹⁰¹,一个光周期内离子(原子)的平均电 离速率为

$$W_{\text{num}} = \omega_{a} E C_{n*l}^{2} f(l, m \left[\frac{3\epsilon}{\pi (2E)^{3/2}} \right]^{1/2} \times \left[\frac{2}{\epsilon} (2E)^{3/2} \right]^{2n^{*} - |m| - 1} \exp\left[-\frac{2}{3\epsilon} (2E)^{3/2} \right]$$

$$f(l, m) = \frac{(2l + 1)(l + |m|)!}{2^{1m}(|m|)(l - |m|)!}$$

$$C_{n*l} = \frac{1}{\sqrt{2\pi n^{*}}} \left(\frac{2e}{n^{*}} \right)^{n^{*}}.$$
(1)

其中原子频率 $\omega_a = 4.134 \times 10^{16} \text{ s}^{-1}$ ε 为激光场的 峰值电场强度(原子单位),*E* 为离子的电离势(原子 单位), n^* 、l、*m* 分别为有效主量子数、轨道量子数 和磁量子数。根据这个电离速率公式,通过求解速率 方程就可以知道各种价态离子的分布。

2.2 团簇内离子能量的获得

根据我们的模型,场电离产生的电子全部飞离 团簇,团簇可看作是一个半径为_{r。}、平均电荷为_q的 "离子球"。没有外场作用时,电荷在平衡状态下应该 分布在团簇表面,但由于相互作用过于快捷,并且离 子之间不可避免地存在相互碰撞,因此在"离子球" 库仑爆炸之前电荷不可能达到理想的平衡状态。我 们曾设想过几种电荷的分布来代入计算,后来发现 具体的电荷分布对计算结果的影响不大(只是造成 了离子能谱在横轴方向的很小偏移),因此为了简化 计算,这里我们采用一种最简单的电荷分布,即认为 电荷是均匀分布的。

对于这个电荷均匀分布的"离子球",其电势能 为

$$E(q) = \frac{N^2 q^2}{8\pi\varepsilon_0 r_c}, \qquad (2)$$

其中 N 为团簇内离子总数。库仑爆炸后,此势能全部转化为离子的动能,根据能量守恒可以算出每个离子获得的平均动能为

$$\overline{E}_{\rm k} = \alpha q^2$$
 , (3)

这里 $\alpha = N / (8\pi\epsilon_0 r_c)$,只与团簇本身有关。

2.3 离子能谱的形成

从(3)式可以看到,离子的不同价态对应着离子 的不同动能,而不同价态离子的产额有一定的分布, 根据离子价态的分布就可以得到离子能量的分布, 即得到离子能谱。另外还得考虑激光脉冲强度的空 间分布对离子价态分布的影响。实际上所用的激光 脉冲聚焦后在激光束的横截面上有一定的强度分 布,一般取为二维的高斯分布,即

$$I(r) = I_{o} \exp(-2r^{2}/a^{2}),$$
 (4)

其中 a 为一个与聚焦后焦斑半径有关的常数。从 (4)式可以看出激光束中心的强度最大,离中心越 远强度越小,这就造成了在相互作用时,离激光束中 心越远的地方电离产生离子的价态越小,这使得整 个团簇中离子价态的分布有了很大的变化:低价态 离子产额增大,高价态离子产额减小。激光与团簇的 相互作用区域可以近似看成是一个沿着激光传播方 向的'圆柱",在这个"圆柱"内,离其中心距离不同 的地方其离子价态的分布也不相同,因此我们需要 对离子价态的分布在整个"圆柱"内积分,才可以得 到离子价态的整体分布。有了离子价态的整体分布, 我们就可以得到相互作用产生的离子能谱。

3 结果与讨论

我们计算了 Ar 原子及各阶 Ar 离子电离速率 随激光功率密度变化的曲线 结果如图 1 所示 ,图中 可以看出随着激光功率密度的增加 ,各种离子的电 离速率增加并依次达到饱和 ,在激光强度足够大 (*I*>10¹⁷ W/cm²)时 ,高价离子的电离变得比低价离 子容易。



Fig. 1 Ionize speed of Ar^{n+} scaling with laser intensity

图 2 显示了在不同激光功率密度下,一个 45 fs 的激光脉冲与 Ar 原子团簇相互作用后的离子分布 情况。可以很形象地看到随着激光功率密度的增加 各价离子产生和电离的情况。对强度越高的激光脉 冲,高价态离子的产额越大。



Fig. 2 Ar^{*n*+} distributions in Ar atomic cluster irradiated by a 45 fs laser pulse with different intensities

在考虑了激光场强空间分布的情况下,计算了 各种价态离子的产额 离子的价态通过(3)式与离子 的能量相对应,这样就可以得到最后的离子能谱。 为了和实验结果相比较,使用的实验参数为^[11]:Ar 原子团簇半径 r = 13.4 nm ;每团簇中所含原子数为 5×10^4 个 这时(3)式中 $\alpha = 2690 \text{ eV/C}^2$ 激光脉宽 为 45 fs (4) 式中的 $a = 25 \ \mu m$ 在 $2 \times 10^{16} \ W/cm^2$ 的 激光功率密度下,计算得到的离子能谱如图3所示, 它与图 4 中实验获得的能谱(截取了离子能量大于 10 keV 的高能端能谱)形状相似。更值得注意的 是 图 3 中计算得到的那些离散的数据点对应着实 验能谱中高能端出现的能峰(实验能谱低能端的峰 由于能谱加宽的影响已经消失)这说明实验能谱中 这些能峰的产生过程主要就是某种电荷态离子从库 仑爆炸中获得能量的过程,从而也更加证明了库仑 爆炸是离子获得能量的主要途径。

图 3 中的离子能谱是理想的单能峰,这是因为 我们没有考虑各种加宽机制。实际上离子的热运动 和离子间相互碰撞等都会引起能峰的加宽。如果考虑这些因素,计算得到的能谱就会更接近真实的能谱,这方面工作正在深入进行中。



Fig. 3 Calculate ion energy spectrum with laser intensity $2\times 10^{16}~W/cm^2$



Fig. 4 Experimental ion energy spectrum with laser intensity $2 \times 10^{16} \ W/cm^2$

结论 本文研究了飞秒强激光与 Ar 原子团簇相互 作用时的电离机制以及库仑爆炸过程,认为团簇中 Ar 原子的电离机制主要是场电离,离子获得能量的 途径主要是库仑爆炸,以此建立了一个简单的模型 计算相互作用产生的离子能谱。计算结果与实验结 果较为吻合,可以较好地解释离子能谱高能端的主 要特征。

参考文献

- [1] Shao Y L, Ditmire T, Tisch J W G et al.. Multi-keV electron generation in the interaction of intense laser pulses with Xe clusters. Phys. Rev. Lett., 1996, 77(16) 3343 ~3348
- [2] Ditmire T , Tisch J W G , Springate E et al . . High-energy ions produced in explosions of superheated atomic clusters. Nature ,1997 , 386(6620) $54\!\sim\!57$
- [3] Dobosz S, Lezius M, Schmidt M et al.. Absolute keV photon yields from ultrashort laser-field-induced hot nanoplasmas. Phys. Rev. (A), 1997, 56(4):R2526~ R2529
- [4] Mcpherson A, Thompson B D, Borisov A B et al..

Multiphoton-induced X-ray emission at $4\sim 5~{\rm keV}$ from Xe atoms with multiple core vacancies. Nature , 1994 , 370 (6491) $631\!\sim\!634$

- [5] Ditmire T, Zweiback J, Yanovsky V P et al... Nuclearfusion from explosions of femtosecond laser-heated deuterium clusters. *Nature*, 1999, **398** (6727) 489~492
- [6] Mcpherson A, Luk T S, Thompson B D et al.. Multiphoton-induced X-ray emission and amplification from clusters. Appl. Phys. (B): Photophys. Laser Chem., 1993, 57(5) 337~347
- [7] Rose-Petruck C, Schafer K J, Wilson K R et al.. Ultrafast electron dynamics and inner-shell ionization in laser driven clusters. Phys. Rev. (A), 1997, 55(2): 1182~1190

- [8] Ditmire T, Donnelly T, Rubenchik A M et al.. Interaction of intense laser pulses with atomic clusters. Phys. Rev. (A), 1996, 53 (5) 3379~3402
- [9] Last I, Jortner J. Multielectron ionization of large rare gas clusters. J. Phys. Chem. (A), 1998, 102(47):9655~ 9659
- [10] Augst S, Meyerhofer D D, Strickland D et al.. Laser ionization of noble gases by coulomb-barrier suppression. J. Opt. Soc. Am. (B), 1991, 8(4) 858~867
- [11] Li Zhong, Lei Anle, Ni Guoquan *et al.*. High-energy ions emitted from Ar clusters irradiated by intense femtosecond laser pulses. *Chin. Phys. Lett.*, 2000, 17 (2) 99~100

Energy Spectrum Calculations of Ions from Ar Atomic Clusters Explosions Irradiated by a Superintense Femtosecond Laser Pulse

Zhu Pinpin Li Zhong Liu Jiansheng Xu Zhizhan

(Laboratory for High Intensity Optics, Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, The Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800) (Received 21 July 2000; revised 28 December 2000)

Abstract: The interaction between a femtosecond laser pulse and Ar atomic clusters is studied, and a simple model is established to calculate the energy spectrum of ions emitted from the exploded clusters. The calculated spectrum is very similar to an experimental one, and it can explain the characters of energy peaks in the experimental energy spectrum.

Key words : femtosecond laser pulse ; cluster ; tunneling ionization ; coulomb explosion