

飞秒强激光脉冲中氙团簇库仑爆炸特性研究*

蔡旭红 李邵辉

(汕头大学物理系, 广东汕头 515063)

摘 要 利用 Bathe 模型, 理论模拟了氙团簇在飞秒强激光中(100 fs, 10^{16} W/cm²)的电离和爆炸过程. 研究结果显示, 在团簇尺寸较小时, 离子平均能量与团簇初始半径平方成正比, 爆炸机制为典型的库仑爆炸. 随着团簇尺寸的增加, 能量增加的速度趋缓并在一定团簇尺寸后趋于饱和. 模拟结果与实验数据有较好的吻合.

关键词 飞秒激光; 氙团簇; 库仑爆炸

中图分类号 O437 **文献标识码** A

0 引言

原子团簇与强激光相互作用是近年来一个十分活跃的研究领域. 团簇是由几十到成千上万个原子通过 van der Waals 力结合而成的纳米颗粒, 单个团簇的密度与固体相当, 对激光能量有很强的吸收; 而团簇喷流(或束流)介质在宏观上为气体密度, 激光可以在其中传输. 因此, 与稀薄气体和大块固体相比, 团簇在与飞秒强激光相互作用时, 兼具气体及固体的优点. 国际上许多研究小组对团簇与强激光相互作用这一领域展开了多方面研究, 实验结果表明团簇对激光能量有非常强的吸收效率^[1], 并且在实验中发现了超短 X 射线辐射^[2], 达到 1 MeV 的高能离子^[3], 以及 keV 量级的高能电子^[4]. 1999 年, 美国的 Livermore 实验室用 35 fs 的强激光脉冲照射 D₂ 团簇时, 获得了高产额的中子, 实现了“台式聚变”^[5]. 在国内, 对飞秒强激光与团簇的相互作用也取得了一定的研究成果^[6~8].

目前已有几种理论模型被用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. Ditmire 等人提出的等离子体球模型中^[9], 认为大多数内电离产生的电子被约束在团簇内, 团簇可看成是一个高密度的等离子体小球, 团簇通过逆韧致吸收被加热, 进而产生流体动力学膨胀. Rose-Petruck 等人提出的“电离点火”模型^[10], 认为激光场与离子场的共同作用导致了团簇的快速电离, 产生高电离态的离子. Last 等人利用经典粒子动力学方法, 通过跟踪单个电子在 1100 个原子的 Xe 团簇中的运动轨迹, 认为团簇内所有的自由电子都会在一个光周期的时间内离开团簇, 团簇进而发生库仑爆炸^[11]. Krainov 等人对大的氙团簇库仑爆炸动力学过程进行了研

究^[12]. 本文利用 Bathe 的过势垒电离模型^[13], 模拟了飞秒强激光场中氙团簇的内电离和外电离过程, 计算了氙团簇库仑爆炸后的离子能量与团簇尺寸的对对应关系, 并与实验结果进行了比较.

1 理论模型

在飞秒强激光场中, 团簇的电离过程由内电离和外电离两个部分组成, 其中, 内电离是指团簇内的电子在激光场的作用下, 脱离其原子核的束缚, 成为团簇内的自由电子; 外电离是指团簇内电离所产生的自由电子, 从团簇中逃逸出来. 外电离开始后, 团簇因正离子的积累而带正电, 并由此产生库仑爆炸.

根据 Bathe 模型的过势垒电离理论^[13], 氙团簇内的原子在飞秒强激光场的作用下, 随着激光电场强度的增加, 发生顺序多重内电离. 在激光电场强度满足 $E(t) = \pi\epsilon_0 I_z^2 / ze^3$ 时, 产生 z 阶电离, 其中 I_z 为第 z 个电子的离化势. 氙离子的最高离子价态取决于激光场的峰值激光强度和氙离子的电子离化势. 内电离发生后, 团簇内的自由电子随即在激光场的作用下脱离团簇, 发生外电离, 团簇因正离子间的库仑斥力而膨胀. 要指出的是, 团簇的外电离过程和膨胀过程是同时进行并相互影响. 类似于团簇的内电离过程, 团簇的外电离过程也采用过势垒电离模型, 势垒来自于团簇因带正电而对电子的吸引. 外电离的电子数目 $Q(t)$ 与激光电场强度 $E(t)$ 和团簇半径 $R(t)$ 满足

$$E(t) = eQ(t) / 4\pi\epsilon_0 R(t)^2 \quad (1)$$

式中, $R(t)$ 是时间的函数. 在外电离过程中, 团簇半径随时间的变化满足

$$m \frac{d^2 R(t)}{dt^2} = \frac{e^2 Q(t) z}{4\pi\epsilon_0 R(t)^2} \quad (2)$$

式中 m 为氙离子质量. 而当外电离过程结束, 团簇内的所有自由电子都从团簇中逃逸出去后, 团簇所带的正电荷数为团簇内的原子数 N 与其价态 z_{\max}

* 国家自然科学基金(No. 60408008)资助项目
Tel: 0754-2903070 Email: shli@stu.edu.cn
收稿日期: 2005-10-24

的乘积. 团簇半径随时间的变化满足

$$m \frac{d^2 R(t)}{dt^2} = \frac{e^2 N z_{\max}^2}{4\pi\epsilon_0 R(t)^2} \quad (3)$$

结合式(1)~(3), 可研究在飞秒强激光场中氩团簇的电离和膨胀特征.

2 模拟结果及分析

在数值模拟中激光脉冲采用常用的高斯分布, $t=0$ 时刻对应激光脉冲的峰值位置. 峰值激光强度为 10^{16} W/cm², 脉冲宽度为 100 fs, 波长 800 nm. 在这样的激光强度下, 根据氩原子的离化势, 团簇内的氩原子电离可达到的最高离子价态 z_{\max} 为 +6 价. 内电离过程中各阶价态的电离时刻可根据所给的激光参量计算得到. 由于团簇的尺寸远小于激光的波长, 团簇内激光电场可以认为是一均匀场, 团簇内离子在同一时间发生过势电离. 图 1 为利用 Bathe 过势电离模型计算得到的初始半径为 2 nm 的氩团簇 ($N \approx 608$ 原子/每团簇) 在飞秒强激光场中的内电离和外电离过程.

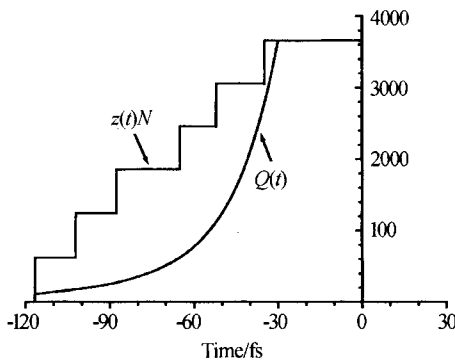


图 1 飞秒强激光场中氩团簇的内电离和外电离过程
Fig. 1 The inner and outer ionization process of argon clusters in intense laser pulses.

从图 1 可以看出, 内电离开始时刻为 $t = -116.74$ fs, 此时, 团簇内的所有原子被电离到 +1 价, 团簇内内电离产生的自由电子数目 $N \approx 608$. 图中 $z(t)N$ 为内电离产生的电子数目 ($z(t)$ 和 N 分别代表团簇内的离子价态和数目), $Q(t)$ 为外电离的电子数目, 在激光脉冲的上升沿, 随着激光电场强度的不断增加, 团簇内的离子从 +1 价不断升高, 在 $t = -35.14$ fs 时刻内电离结束, 氩离子达到最高价态 +6 价. 在这段时间里, 内电离产生的自由电子总数也阶梯状的增加到 $z_{\max} N = 3648$. 随着内电离的开始, 外电离也随之进行. 从式(1)可知, 外电离由团簇尺寸和激光电场强度两个因素所决定. 在从内电离开始到 $t \approx -60$ fs 这段时间里, 外电离过程进行的非常缓慢. 但是随着激光电场的增强和团簇的膨胀, 在随后的时间里, 外电离过程进行的很迅速, 并在内电离结束后很快完成外电离过程.

图 2 是该团簇的膨胀速度随时间的演化过程. 在外电离开始后, 团簇由于离子间的库仑斥力而发生膨胀. 与图(1)相对应, 在 $t \approx -60$ fs 之前, 由于团簇带电量较少, 团簇的膨胀速度虽不断增加, 但是比较缓慢. 在 $t \approx -60$ fs 时刻到外电离结束这段时间内, 由于外电离的快速进行, 团簇所带正电荷急剧增加, 而此时团簇的尺寸还增加得比较少, 离子间的库仑斥力很大, 因此团簇膨胀速度迅速增加. 在外电离结束后, 团簇所带电量保持不变. 虽然团簇由于离子间的库仑斥力使得膨胀速度仍继续增大, 但是由于团簇尺寸的不断增大, 离子间的库仑斥力越来越小, 团簇的膨胀速度渐趋饱和. 图 3 是团簇的半径随时间的变化. 在外电离的初始阶段, 团簇的半径增长很慢, 说明这时团簇的膨胀速度很慢. 在随后的时间里, 团簇半径迅速增加, 并逐渐与时间成线性关系, 说明团簇的膨胀速度快速提高并逐渐达到一稳定值. 这些都与团簇膨胀速度随时间的变化相对应.

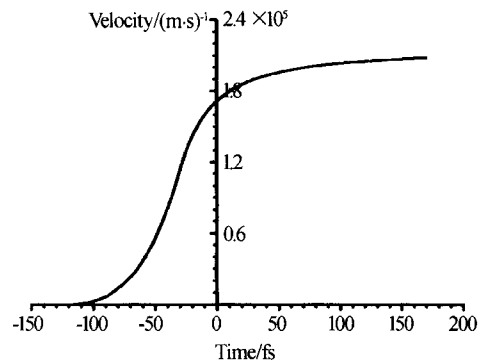


图 2 飞秒强激光场中氩团簇的膨胀速度随时间的变化
Fig. 2 The variation of expansion velocity of argon clusters with time in intense laser pulses

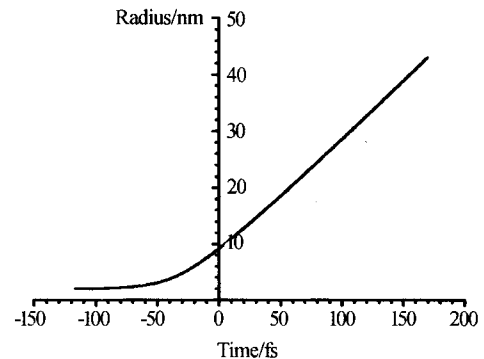


图 3 飞秒强激光场中氩团簇半径随时间的变化
Fig. 3 The variation of the radius of argon clusters with time in intense laser pulses

Lezius 等^[14]人利用质谱的方法研究了飞秒强激光场中氩团簇爆炸后离子能量与其价态的关系, 认为在团簇尺寸小于 1.5×10^5 原子/每团簇时, 氩团簇的爆炸机理主要是库仑爆炸. 对于由同种原子构成的团簇, 原子密度均匀一致. 如果团簇内原子

电离后所达到的价态近似认为相同(如本文所假设的那样),并且团簇爆炸的机理为库仑爆炸,则爆炸后离子的能量应当与团簇初始半径的平方成正比.在最近的飞秒强激光与氩团簇相互作用实验中,发现,在类似的激光参量下,团簇爆炸后的氩离子平均能量与团簇的初始半径呈 1.5 次方的指数关系^[8].为了与实验数据进行对比,计算了氩团簇爆炸后的离子平均能量及其随团簇尺寸的变化.发生库仑爆炸的团簇,其爆炸后最高能量的离子为处在团簇表面的离子,离子平均能量则为最高能量的 3/5.根据不同尺寸团簇爆炸后的膨胀速度,就可获得离子平均能量随团簇尺寸的变化,计算结果见图 4.

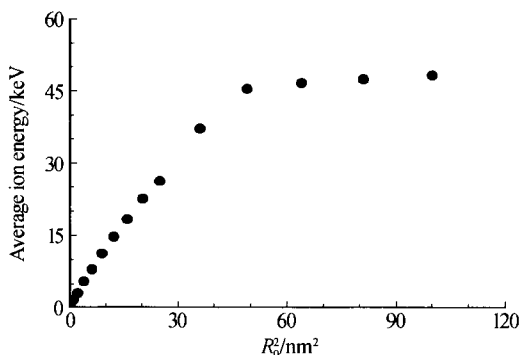


图 4 离子平均能量随团簇初始半径平方的变化
Fig. 4 The variation of average energy with the square of initial cluster size

图 4 是离子的平均能量随团簇初始半径平方的变化.可以看出,在团簇尺寸较小时,氩离子的平均能量近似与团簇半径的平方成正比,说明此时团簇的爆炸机理为典型的库仑爆炸.随着团簇尺寸的增大,这一指数下降到约 1.8.在团簇的初始半径超过 7 nm(相当于 2.6×10^4 原子/每团簇),氩离子的平均能量只有少许的增加.这是由于,随着团簇尺寸的增大,外电离所需时间变长,这势必会降低团簇爆炸后离子的能量.当团簇的尺寸增加到一定程度以后,内电离产生的自由电子无法通过外电离完全逃逸出去,此时增加团簇尺寸已经对团簇的库仑爆炸过程影响不大,因此爆炸后氩离子的能量增加已不再显著.

实验结果中,离子的平均能量随团簇尺寸是指指数增加后渐趋饱和.模拟结果与实验数据基本吻合.但这一变化是渐进的,而在模拟结果中则有一个比较明显的临界尺寸,当团簇尺寸超过该临界尺寸后,离子能量的增加非常有限;另外,在临界尺度以下,对于同一团簇尺寸,计算所得的离子平均能量比实验结果稍有偏高.对于前者,应该是由飞秒强激光与团簇相互作用的实验特点以及本文所采用的理论模型的局限所导致的.一方面,在模拟计算中,采用

的是固定的峰值激光强度和团簇尺寸,而在实验中,受团簇形成的特点所决定,参与相互作用的团簇尺寸有非常宽的分布,所谓的团簇尺寸是指团簇的平均尺寸而已.因此实验获得的离子能量随团簇尺寸的变化在一定程度上被平滑了.另一方面,理论模型只考虑了由离子间的库仑斥力所导致的团簇爆炸.在团簇尺寸较大时,由于激光电场已无法将所有电子外电离,团簇内的自由电子将通过逆韧致吸收获得能量,从而达到较高的电子温度.这时,电子的碰撞电离及其它增强电离机制将不可忽略,团簇内的离子将被电离到更高的价态,同时产生更多的自由电子.团簇将在离子间的库仑斥力和电子热运动所产生的流体动力学压力共同作用下发生爆炸,并且后者所起作用将随团簇尺寸变大而加强.因此,在团簇尺寸超过临界尺寸时,团簇爆炸后离子的能量应当随着团簇尺寸的增加而相应的有所增大.至于在同一团簇尺寸下,计算所得的离子平均能量比实验结果稍有偏高,是因为到目前为止,团簇尺寸的计算还只是根据气体的背压和喷嘴的张角等参量,利用经验公式计算而得^[14,15],不同的经验公式计算得到的团簇尺寸往往有较大差别.另外,实验上的激光峰值强度指的是激光被聚焦后焦斑中心区域的强度,而实验测量到的离子来自整个相互作用区,包括焦斑外围低强度激光与氩团簇相互作用产生的能量较低的氩离子,这势必会降低离子的平均能量.考虑到这些因素的影响,利用这种过势垒电离模型还是能够比较好的描述飞秒强激光脉冲与氩团簇的相互作用,并且与实验结果有较好的吻合.

3 结论

利用 Bathe 的过势垒电离模型,对飞秒强激光与氩团簇的相互作用进行了研究.通过研究团簇的外电离过程,对团簇的膨胀速度及半径随时间的演化过程进行了分析.对团簇爆炸后氩离子平均能量对团簇初始半径依赖关系的研究表明,在团簇尺寸较小时,离子平均能量与团簇初始半径平方成正比,爆炸机理为典型的库仑爆炸.随着团簇尺寸的增加,能量增加的速度趋缓并在一定团簇尺寸后趋于饱和.这一模拟结果与实验数据有较好的吻合.

参考文献

- 1 Ditmire T, Smith R A, Tisch J W G, *et al.* High intensity laser absorption by gases of atomic clusters. *Phys Rev Lett*, 1997, **78**(16): 3121~3124
- 2 McPherson A, Luk T S, Thompson, *et al.* Multiphoton induced X-ray emission from Kr clusters on M-Shell ($\sim 100\text{\AA}$) and L-shell ($\sim 6\text{\AA}$) transitions. *Phys Rev Lett*,

- 1994, **72**(12): 1810~1813
- 3 Ditmire T, Tisch J W G, Springer E, *et al.* High-energy ions produced in explosions of superheated atomic clusters. *Nature*, 1997, **386**(6620): 54~56
 - 4 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): 3343~3346
 - 5 Ditmire T, Zweiback J, Yanovsky V P, *et al.* Nuclear fusion from explosions of femtosecond laser-heated deuterium clusters. *Nature*, 1999, **398**(6727): 489~491
 - 6 王向欣, 王成, 李邵辉, 等. 飞秒强激光经氙气和氩团簇的传播. *光子学报*, 2005, **34**(7): 961~963
Wang X X, Wang C, Li S H, *et al.* *Acta Photonica Sinica*, 2005, **34**(7): 961~963
 - 7 郝希平, 宋霄薇. 强激光场中原子团簇的电离和光辐射. *光子学报*, 2000, **29**(6): 537~540
Hao X P, Song X W. *Acta Photonica Sinica*, 2000, **29**(6): 537~540
 - 8 李邵辉, 王成, 刘建胜, 等. 飞秒强激光场中大尺寸氩团簇爆炸机理的实验研究. *物理学报*, 2005, **54**(2): 636~641
Li S H, Wang C, Liu J S, *et al.* *Acta Physica Sinica*, 2005, **54**(2): 636~641
 - 9 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
 - 10 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
 - 11 Last I, Jortner J. Dynamics of the coulomb explosion of large clusters in a strong laser field. *Phys Rev A*, 2000, **62**(1): 013201~9
 - 12 Krainov V P, Roshchupkin A S. Dynamics of coulomb explosion of large Xe clusters irradiated by a superintense ultra-short laser pulse. *J Phys B: At Mol Opt Phys*, 2001, **34**(9): L297~L303
 - 13 Bethe H, Salpeter E E. *Quantum Mechanics of One- and Two-electrons Atoms* 2nd edn (New York: Rosette), 1977
 - 14 Lezius M, Dobosz S, Normand D, *et al.* Explosion dynamic of rare Gas clusters in strong laser fields. *Phys Rev Lett*, 1998, **80**(2): 261~264
 - 15 Dorchies F, Blasco F, Caillaud T, *et al.* Spatial distribution of cluster size and density in supersonic jets as targets for intense laser pulses. *Phys Rev A*, 2003, **68**(2): 023201~8

Characteristics of Coulomb Explosion of Argon Clusters in Intense Femtosecond Laser Pulses

Cai Xuhong, Li Shaohui

Department of Physics Shantou University, Guangdong Shantou 515063

Received date: 2005-10-24

Abstract Using Bathe model, the ionization and explosion process of argon clusters in intense femtosecond laser pulses (100 fs , 10^{16} W/cm^2) has been studied. The results show that the average energy of argon ions is proportional to the square of initial radius of the cluster for small clusters, and the explosion mechanism is typical Coulomb explosion. With increasing cluster size, the average energy of argon ions increases slowly and gets saturated gradually beyond a critical cluster size. The simulation results are in good agreement with experimental results.

Keywords Femtosecond laser pulse; Argon clusters; Coulomb explosion



Cai Xuhong was born in 1973 in Guangdong Province. She received the bachelor's degree from Physics Department of Shantou University in 1995. Now, she is a master candidate in Shantou University, her current research interests include photonic crystal and interactions of high-intensity ultrashort-pulse laser with matter.