

§ 4.1 原子光谱-强激光场效应



激光由于其单色性好，因而单色亮度很强，如果强度较大，常常能使原子产生多光子吸收而到达高激发态或电离连续区。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{i\hbar e}{m} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2 \right] \Psi(\mathbf{r}, t)$$

强场的情形

$$\frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2$$

要使原子能瞬时吸收多光子的效应强，需要激光器的脉冲能量大，脉冲宽度窄，也就是功率要大，同时激光束的直径要小，因此用光场强度 I 来表征激光器的这一性能指标，它(以W/cm²为单位)与电场强度和功率 的关系如下：

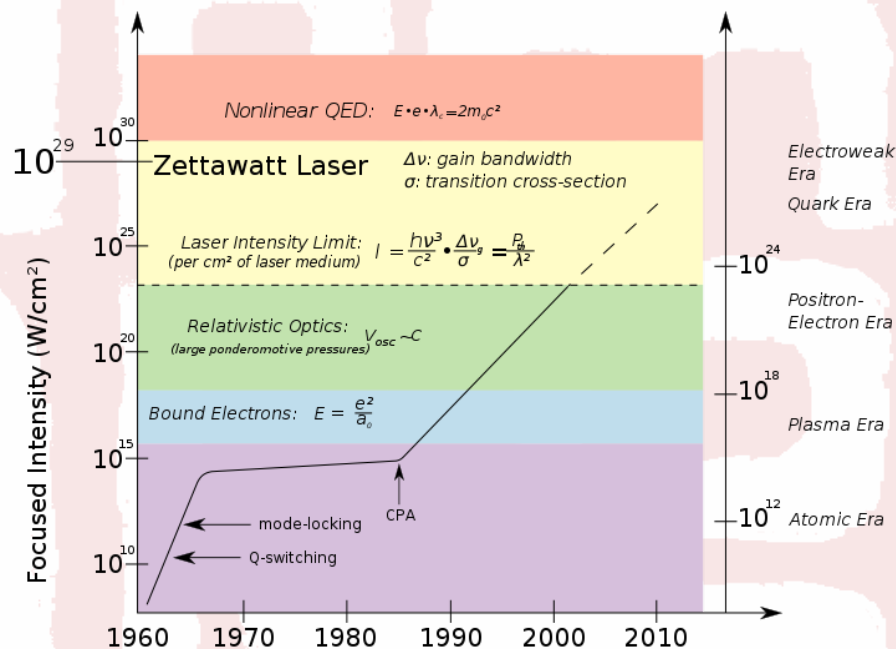
$$I = \frac{c}{8\pi} \epsilon^2 = \frac{\text{功率}}{\text{焦斑面积}}$$

§ 4.1 原子光谱-强激光场效应



Adv.At.Mol.Phys.

自七十年代以来,由于激光惯性约束核聚变以及原子分子物理等研究的需要,高功率、超短脉冲激光技术迅速发展,激光器的光场强度(或简称光强)迅速提高,已经发现了许多新的现象。通常把 $I > 10^{10} \text{W/cm}^2$ 的激光场称为强场。目前达到的极端参数是用KrF准分子激光系统实现的: 能量100 J, 脉冲宽度100 fs (10^{-13}s), $I = 10^{22} \text{W/cm}^2$ 。



§ 4.1 原子光谱-强激光场效应



Adv.At.Mol.Phys.

上海光机所的神光II高功率钕玻璃激光装置有8路，每路的功率为 10^{12} W，能量600J，脉冲宽度1.2 ns，光场强度 5×10^{14} W/cm²。



神光II装置激光主放大系统



神光II装置激光靶场系统

§ 4.1 原子光谱-强激光场效应



Adv.At.Mol.Phy.

惯性约束聚变ICF

● 点火方式：中心点火

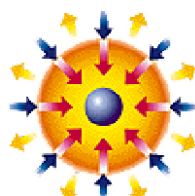
- 激光能量
- 释放的聚变能
- 向里传输的热能

惯性约束聚变(ICF)的四个阶段



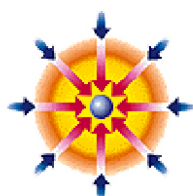
激光辐射

强激光束快速加热氘氚靶丸表面，形成一个等离子体烧蚀层。



内爆压缩

靶丸表面热物质向外蒸发，反向压缩燃料。



聚变点火

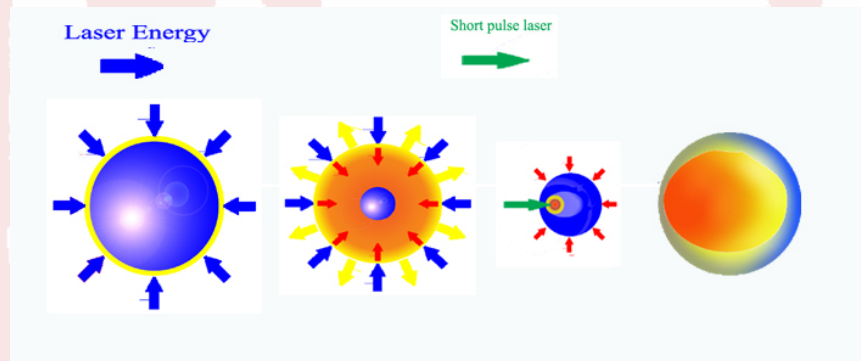
通过向心聚爆过程，氘氚核燃料达到高温、高密度状态。



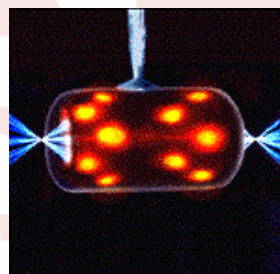
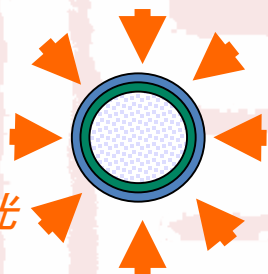
聚变燃烧

热核燃烧在被压缩燃料内部蔓延，产生数倍的能量增益。

快点火



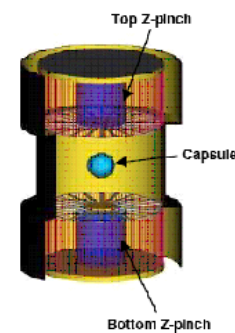
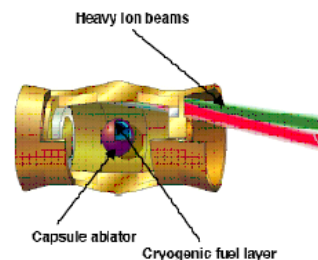
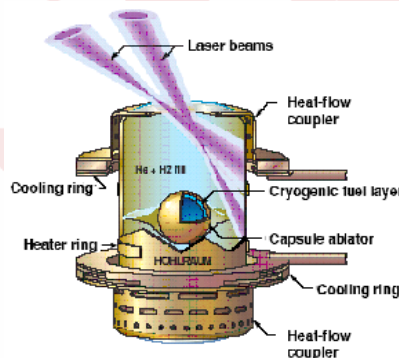
● 驱动方式



直接驱动

间接驱动

● 驱动源



§ 4.1 原子光谱-强激光场效应

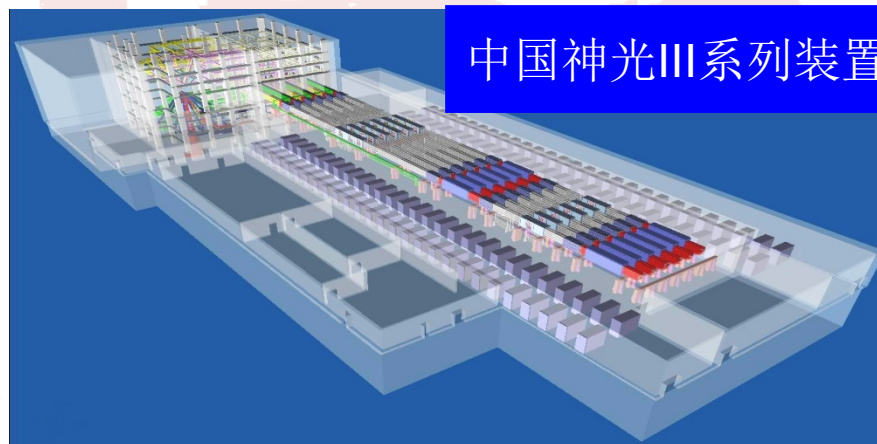
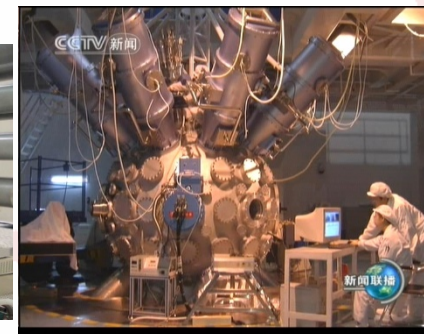


Adv.At.Mol.Phys.

ICF: (1) 实验室中产生物质的高能量密度状态
全面禁核试后的核爆聚变过程模拟
(2) 聚变能源



美国NIF装置, 192束, 1.8MJ



中国神光III系列装置

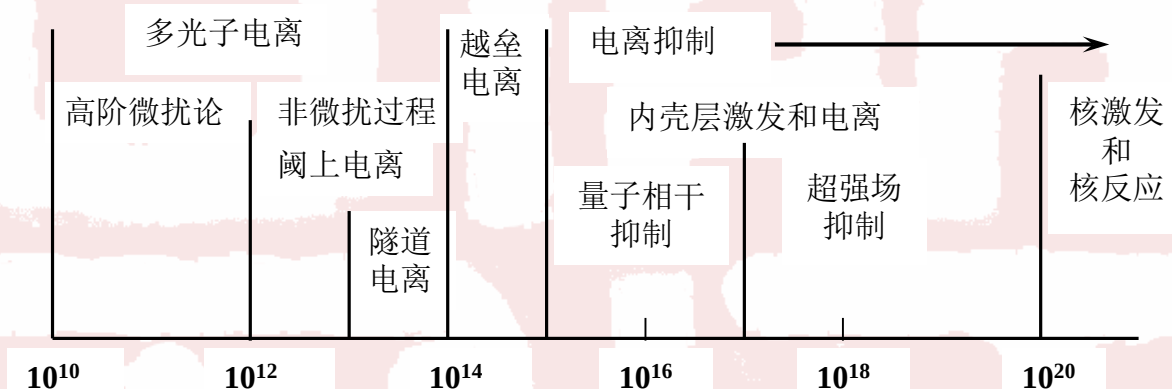
60束, 60KJ

§ 4.1 原子光谱-强激光场效应



Adv.At.Mol.Phys.

按照激光场的光强，原子与强激光场的相互作用大致分成几个区域。



强激光场与原子相互作用区域

§ 4.1 原子光谱-强激光场效应



(1) $10^{10} - 10^{12} \text{ W/cm}^2$, 发生感生束缚态间共振、(普通)多光子电离。在这一区域高阶微扰论仍适用, 是**非线性**光学区。

(2) $10^{12} - 3.5 \times 10^{16} \text{ W/cm}^2$, 激光场光强 $3.5 \times 10^{16} \text{ W/cm}^2$ 相应的电场强度已达到 $e/a_0^2 = 5.1 \times 10^9 \text{ V/cm}$, 相当于氢原子内电子所受的原子核束缚电场强度。这一区域发生阈上电离、隧道电离、越垒电离和**高次谐波**, 已是非微扰过程, 可产生高亮度X射线源和X射线激光。

(3) $3.5 \times 10^{16} - 10^{20} \text{ W/cm}^2$, 发生内壳层光激发和光电离, 这一区域已经是电离抑制区域。激光的电场强度已远大于电子在原子中的库仑场, 原子会在极短的时间被电离, 产生高能电子和质子, 产生相对论等离子体和硬X射线。

(4) $> 10^{20} \text{ W/cm}^2$, 在这一区域发生核能态的激发和核反应, 进一步产生中子和 γ 射线, 形成惯性约束核聚变。

§ 4.1 原子光谱-强激光场效应



Adv.At.Mol.Phys.

$10^{10} - 10^{12} \text{ W/cm}^2$, 发生感生束缚态间共振、(普通)多光子电离。在这一区域高阶微扰论适用, 是非线性光学区。

最低阶微扰理论

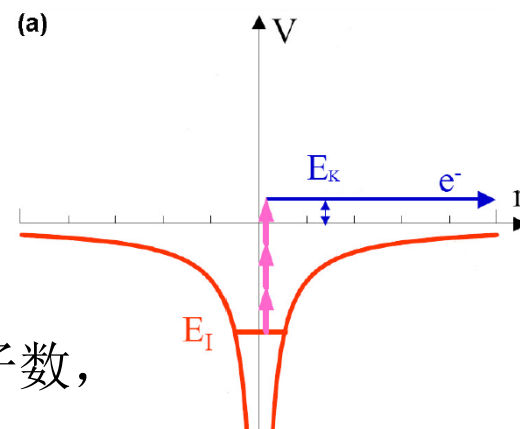
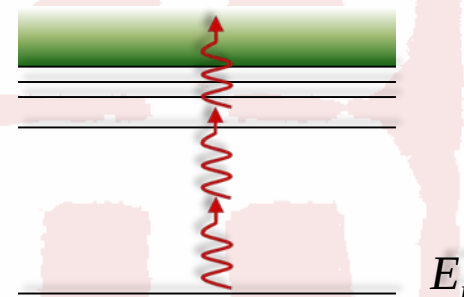
$$W_{fi}^{ny} = \left(\frac{2\pi}{\hbar} \right) (2\pi\alpha\hbar)^n I^n |T_{fi}^{(n)}|^2 \rho_f$$

$$T_{fi}^{(n)} = \sum_{k_1} \sum_{k_2} \cdots \sum_{k_{n-1}} \frac{\langle \psi_f | \hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla | \psi_{k_{n-1}} \rangle \cdots \langle \psi_{k_2} | \hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla | \psi_{k_1} \rangle \langle \psi_{k_1} | \hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla | \psi_i \rangle}{(E_i + (n-1)\hbar\omega - E_{k_{n-1}}) \cdots (E_i + 2\hbar\omega - E_{k_2})(E_i + \hbar\omega - E_{k_1})}$$

原子中一个电子吸收所需最少数目的光子后从基态跃迁到连续态, 光电子动能 E_e 很小:

$$E_e = m\hbar\nu - E_i, \quad m = 1, 2, \dots$$

式中 E_i 是无场时的原子电离能, m 是吸收的光子数, ν 是激光频率。



§ 4.1 原子光谱-强激光场效应



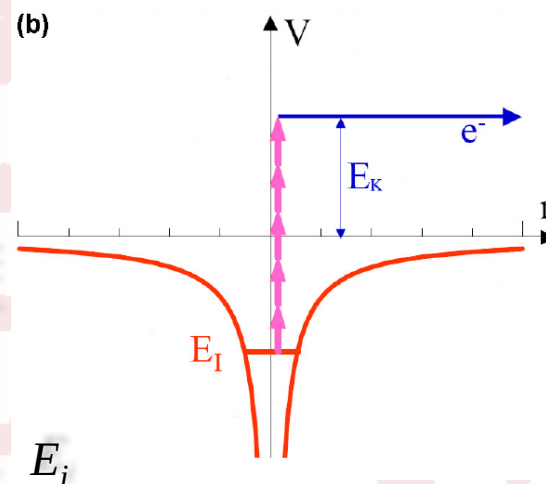
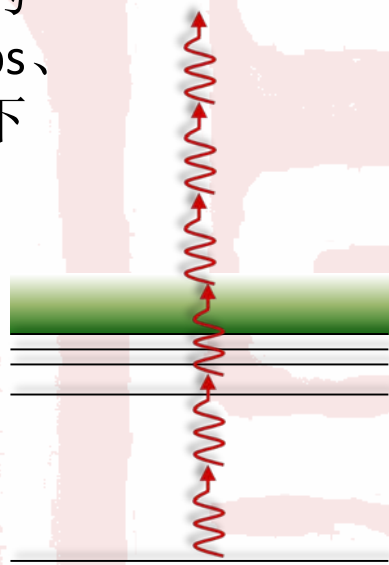
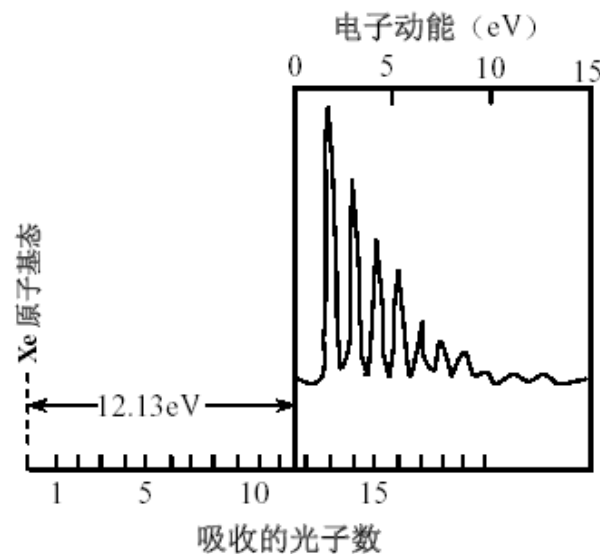
Adv.At.Mol.Phys.

$>10^{12} \text{ W/cm}^2$

阈上电离ATI (Above-Threshold Ionization)

电子被多光子电离后，还可继续吸收光子，它是另一种典型的强激光场中多光子电离现象。

右图给出Xe原子在波长为1064 nm、脉冲宽度为135 ps、强度为 10^{12} W/cm^2 的脉冲场下的阈上电离光电子能谱。



§ 4.1 原子光谱-强激光场效应



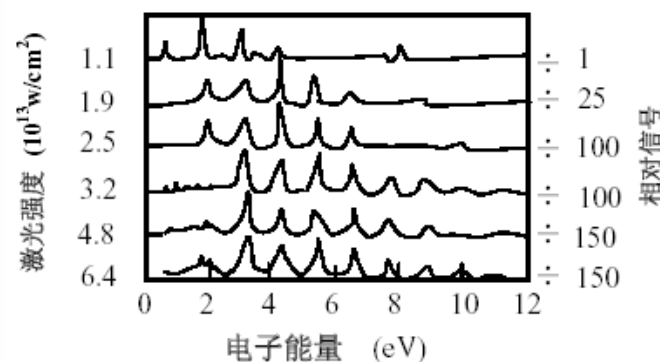
(a) 光电子能谱由多个间距为一个光子能量的谱峰组成，峰的位置与光强无关，对应的电子动能 E_{ATI} 与普通的单光子电离的电子动能 E_e 的关系为：

$$E_e = m h \nu - E_i, \quad m = 1, 2, \dots$$

$$E_{\text{ATI}} = E_e + n h \nu, \quad n = 1, 2, \dots$$

式中 E_i 是无场时的原子电离能， m 是普通多光子电离吸收的光子数， n 是阈上电离吸收的光子数， ν 是激光频率。谱中各个单峰相应于被电离的光电子的一系列相互独立的光子吸收过程，即光电子自由-自由跃迁，可用高阶微扰论解释。

- (b) 峰的数目随光强增大而增多；
- (c) 峰的强度随 n 的增大而迅速下降。



§ 4.1 原子光谱-强激光场效应



$\geq 10^{13} \text{ W/cm}^2$

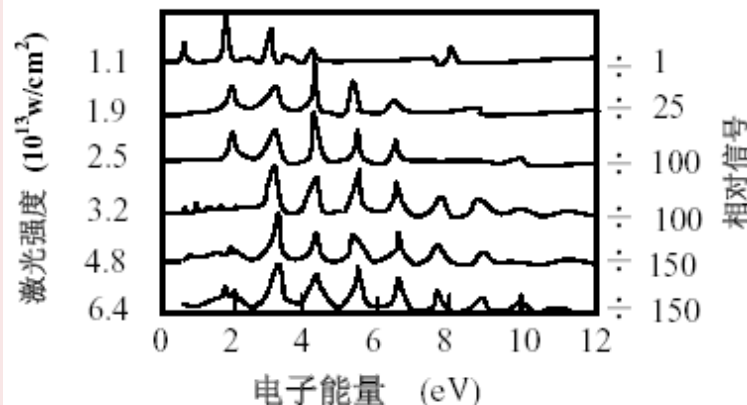
- 在较高光强下，**阈上电离**出现一些新特点。

随光强增大，首先是最低阶峰的幅值降低直至完全消失，接着第二个峰也被抑制。因此，发生**低能峰抑制**，最高峰向高能方向转移现象。这些**不能用微扰论解释**。

随激光**脉冲变窄**，阈上电离峰逐渐展宽、分裂，并向低能方向移动(红移)。这是由于在很短的脉冲期间，电子来不及穿过聚焦光束而被加速，因而只能获得很少能量。

精细结构：**AC斯塔克效应**。

- 激光场光强进一步增大后，光电子能谱中周期性斯塔克共振峰和阈上电离峰逐渐减弱，最后消失。



§ 4.1 原子光谱-强激光场效应



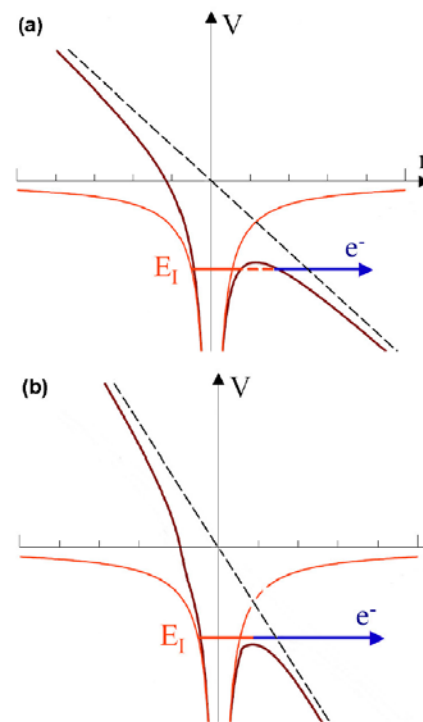
Adv.At.Mol.Phys.

场电离

当激光光强接近原子内的库仑电场强度，激光的电场本身可以直接使原子发生电离，这一过程称为**场电离**。当光强较小时，场电离的速率远小于碰撞电离的速率，场电离效应可以忽略。但在强场下，激光的场电离就逐步起作用，而最终会成为电离的主要机制。

$10^{13} - 10^{14} \text{ W/cm}^2$ **隧道电离:**

激光场与原子的库仑电场联合作用使原子的势场形成势垒，并被压低，电子可以贯穿它而成为自由电子



$10^{14} - 10^{15} \text{ W/cm}^2$ **越垒电离**

当激光电场增大到某个临界值后，势垒高度降低到等于或超过原子的电离电势时，电子就能够直接越过它而成为自由电子，这一过程称为越过势垒电离，或越垒电离。

Keldysh准静态电场近似

不再是多光子电离了。

§ 4.1 原子光谱-强激光场效应



Adv.At.Mol.Phys.

高次谐波产生

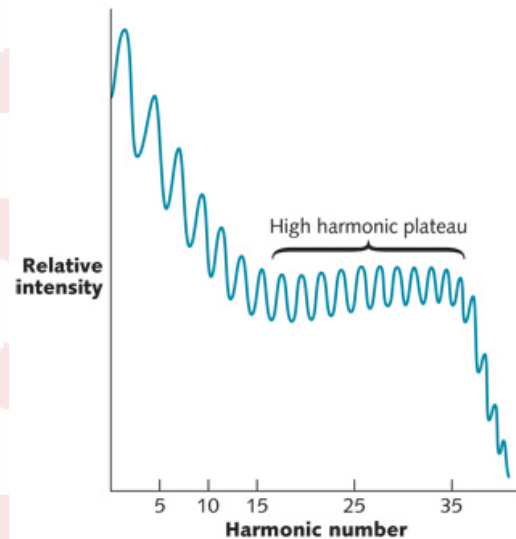
强激光场与原子作用会产生数倍与驱动激光光子能量的高能光子，其能谱一直延伸到：

$$E_{IP} + 3U_p$$

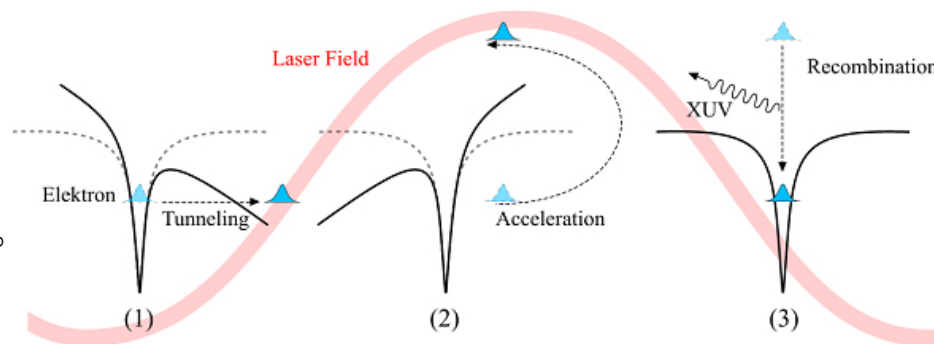
自由电子在强激光中会与激光电场一起振荡，电子获得一个有质动力势：

$$U_p = \left\langle \frac{e^2 E^2}{4m\omega^2} \right\rangle$$

其中<>表示对一个光学周期做平均。



高次谐波谱



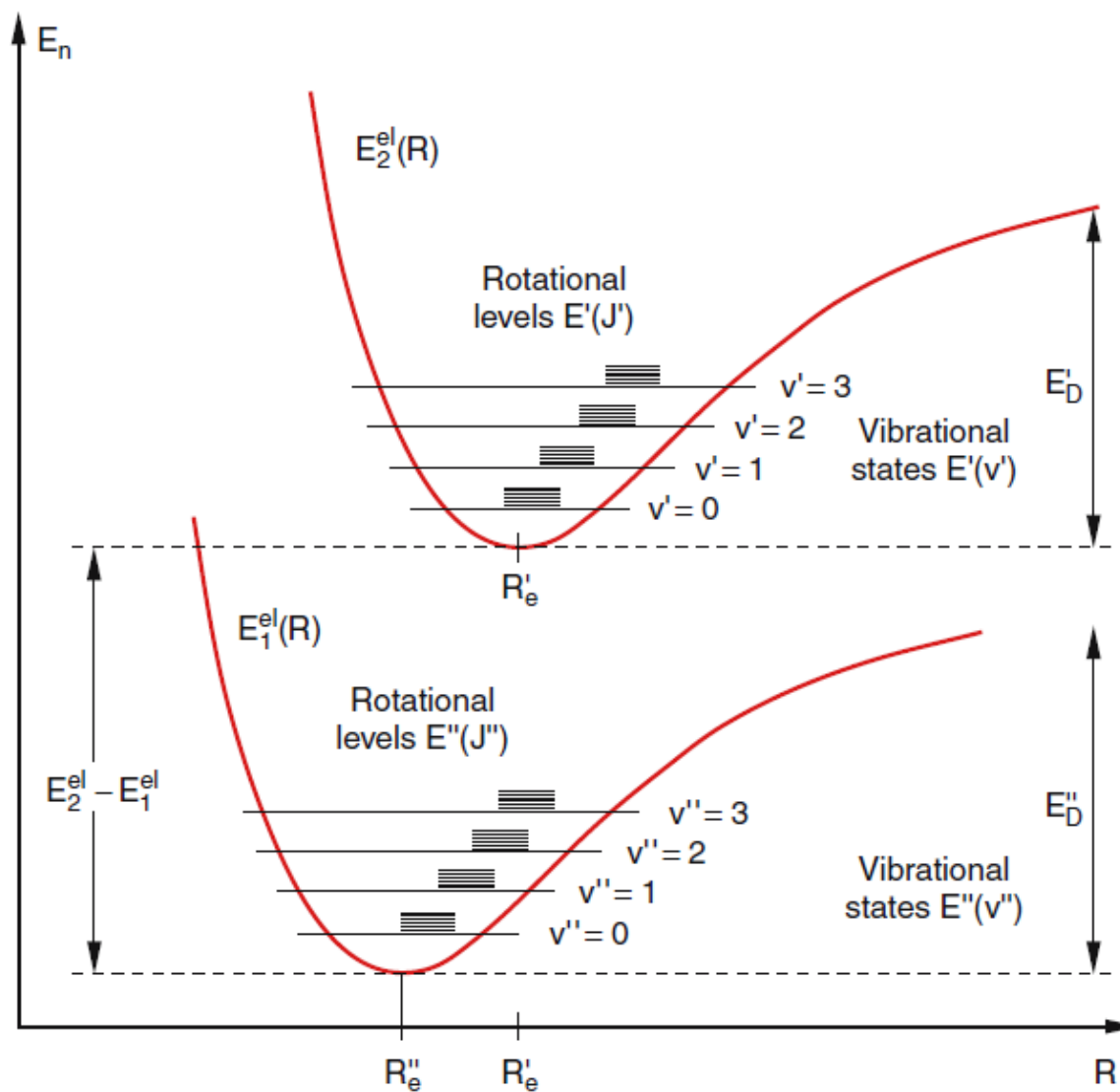
三步重散射图像

饱和光强

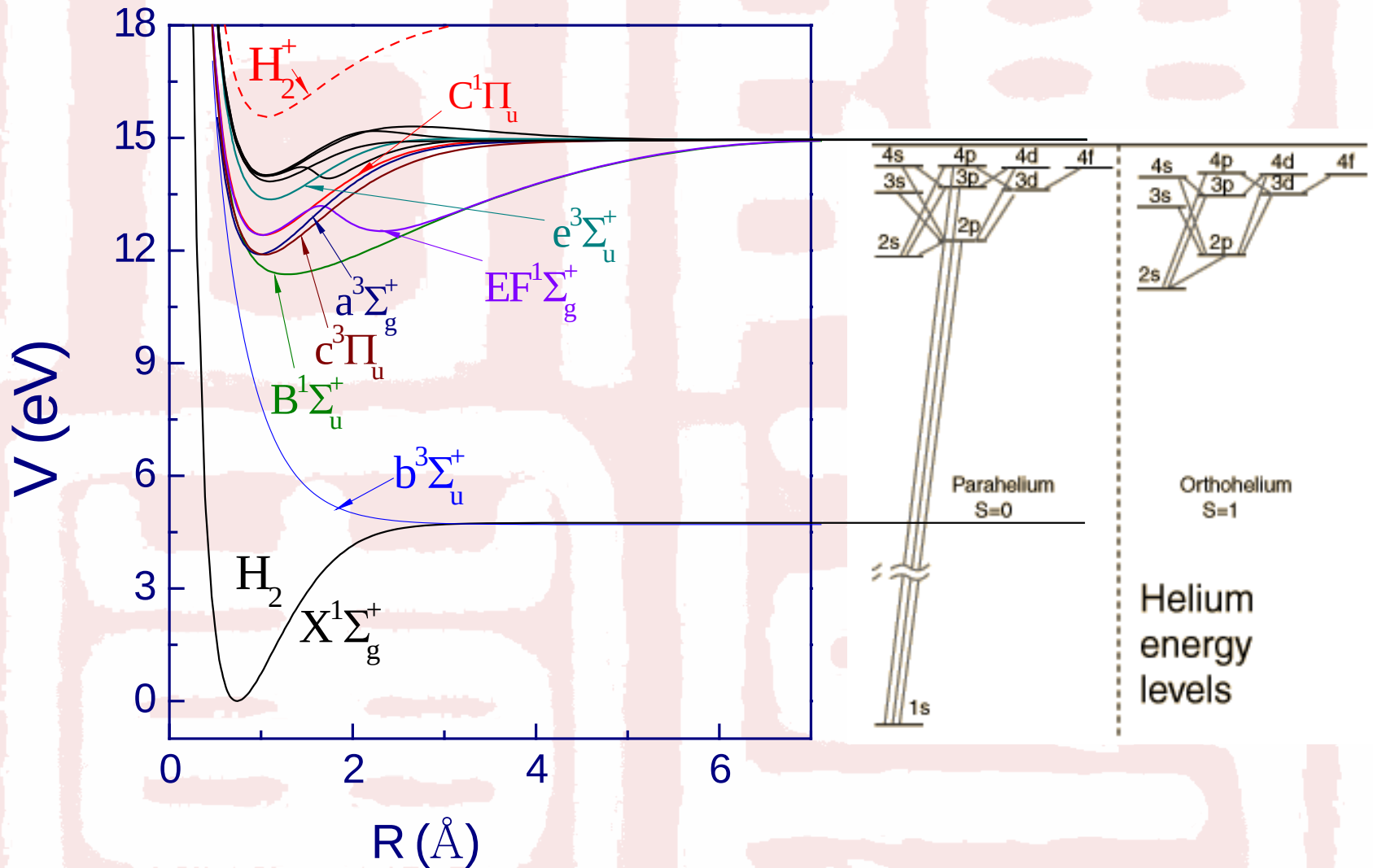
无论通过哪种方式电离，原子的电离速率均随激光强度而迅速增长，当激光强度达到一定程度时，在激光脉冲的持续时间内，原子的电离概率为1，此时对应的激光强度称为饱和光强。例如，即使是铀原子这样重的原子，在 10^{21} W/cm^2 光强下，其中的电子也可以在极短的时间内($<10^{-12} \text{ s}$)被全部剥离，形成铀的裸核离子 U^{92+}

激光场再强，就进入电离抑制区域，这时原子在强激光场中保持原子状态而不再被电离。在这一区域也可能发生内壳层多光子激发和多光子电离。当激光场光强 $>10^{20} \text{ W/cm}^2$ 时，可能发生核能态的激发和核反应。

§ 4.2 分子光谱- 双原子分子能级结构



§ 4.2 分子光谱- 双原子分子能级结构



§ 4.2 分子光谱- 双原子分子能级结构

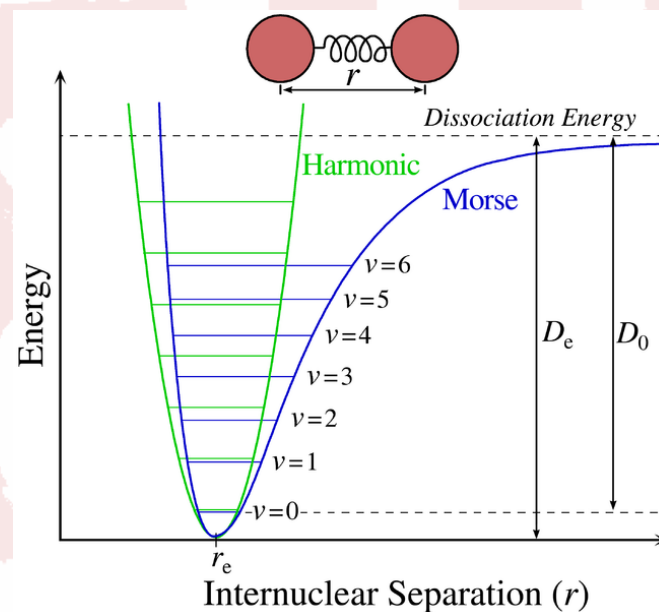


$$\bar{E}_{s,v,J} = -D_e + \hbar\omega_0 \left[\left(v + \frac{1}{2} \right) - \beta \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \right] + \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} J(J+1) - bJ^2(J+1)^2 - a \left(v + \frac{1}{2} \right) J(J+1)$$

其中

$$a = \frac{3\hbar^3\omega_0}{4\mu\alpha R_0^3 D_e} \left(1 - \frac{1}{\alpha R_0} \right)$$

$$b = \frac{\hbar^4}{4\mu^2\alpha^2 R_0^6 D_e}$$



§ 4.2 分子光谱- 双原子分子光谱

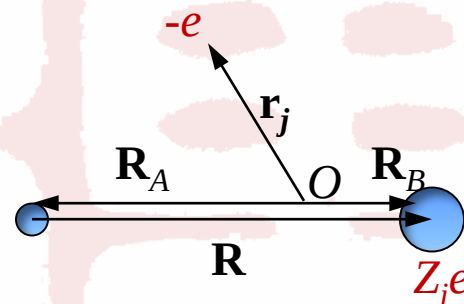


单电子原子的电偶极近似

$$M_{ba}^{E_1} = \frac{m\omega_{ba}}{e\hbar} \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{D}_{ba}$$

电偶极算符 $\mathbf{D} = -e\mathbf{r}$

电偶极矩阵元 $\mathbf{D}_{ba} = \langle \psi_b | -e\mathbf{r} | \psi_a \rangle$



分子的电偶极算符 $\mathbf{D} = e \left(\sum_i Z_i \mathbf{R}_i - \sum_j \mathbf{r}_j \right)$

分子处在 $|a\rangle$ 态的永久的电偶极矩

$$\mathbf{D}_{aa} = \langle \Psi_a | \mathbf{D} | \Psi_a \rangle$$

对于异核双原子分子，有有限大小的永久电偶极矩。

对于同核双原子分子，没有永久的电偶极矩。

分子的转动和振动保持分子的对称性不变，所以对于对称的同核双原子分子，如果分子的电子态不变，则振动态和转动态对应的电偶极跃迁矩阵元为零。

§ 4.2 分子光谱- 双原子分子远红外转动光谱

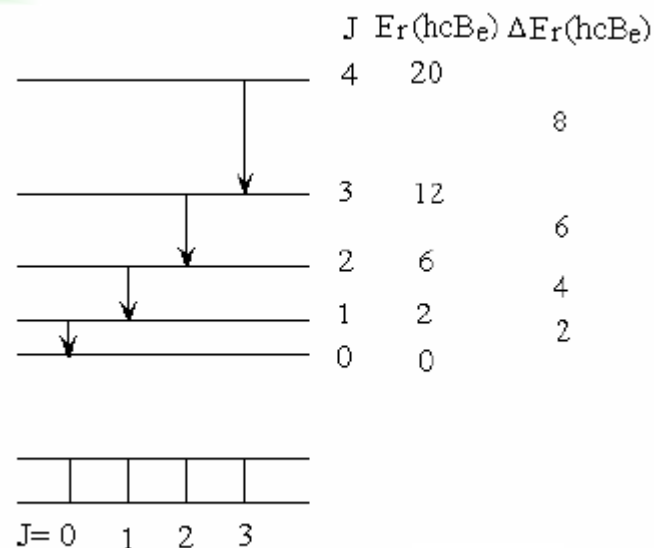
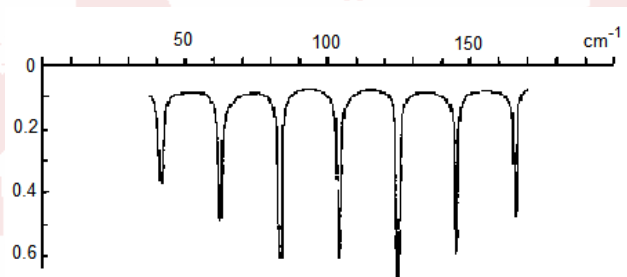


Adv.At.Mol.Phys.

对于异核双原子分子， 如果只有转动能级改变： 纯转动光谱

电偶极跃迁选择定则 $\Delta J = \pm 1, \Delta M_J = 0, \pm 1$

(吸收或辐射的光子带有单位角动量)



$$E_J = \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} J(J+1) - \frac{\hbar^4}{2k\mu^2 R_0^6} J^2(J+1)^2$$

$$hc\tilde{\nu} = \frac{\hbar^2}{2\mu R_0^2} [(J+1)(J+2) - J(J+1)] = \frac{\hbar^2}{\mu R_0^2} (J+1) = 2B(J+1)$$

§ 4.2 分子光谱- 双原子分子红外振转光谱



对于异核双原子分子， 如果发生振动能级改变： 振转光谱

振动跃迁的电偶极矩阵元

$$\mathbf{D}_{v'v} = \int_0^\infty \psi_{v'}^*(R - R_0) \mathbf{D}(R) \psi_v(R - R_0) dR$$

展开

$$\mathbf{D}(R) = \mathbf{D}(R_0) + (R - R_0) \left. \frac{d\mathbf{D}(R)}{dR} \right|_{R=R_0} + \dots$$

振幅不大的情况下， 忽略平方以上项(谐振子近似)

$$\mathbf{D}_{v'v} = \left. \frac{d\mathbf{D}(R)}{dR} \right|_{R=R_0} \int_0^\infty \psi_{v'}^*(R - R_0) (R - R_0) \psi_v(R - R_0) dR$$

(用到了 ψ_v 和 $\psi_{v'}$ 的正交性)

谐振子波函数

$$\psi_v(x) = N_v e^{-\alpha^2 x^2 / 2} H_v(\alpha x)$$

电偶极跃迁选择定则

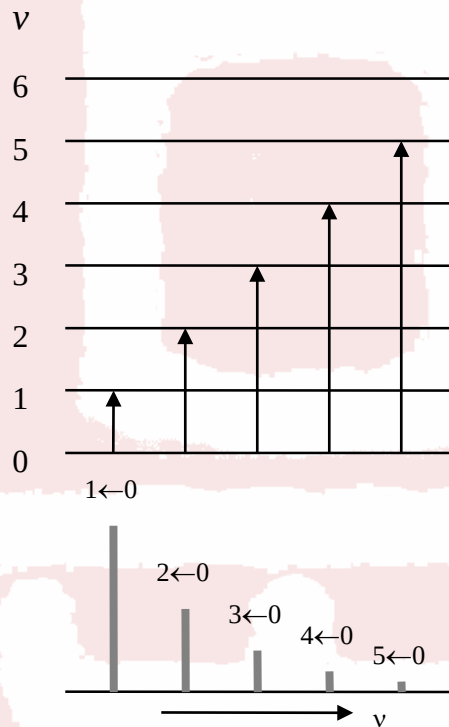
$$\Delta v = \pm 1$$

§ 4.2 分子光谱- 双原子分子红外振转光谱



Adv.At.Mol.Phys.

非谐修正: $\Delta v = \pm 1, \pm 2, \dots$



强度迅速下降

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) a - \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 b$$

$$\tilde{\nu}(v \leftarrow 0) = v\tilde{\nu}_0 - v(v+1)\eta\tilde{\nu}_0$$

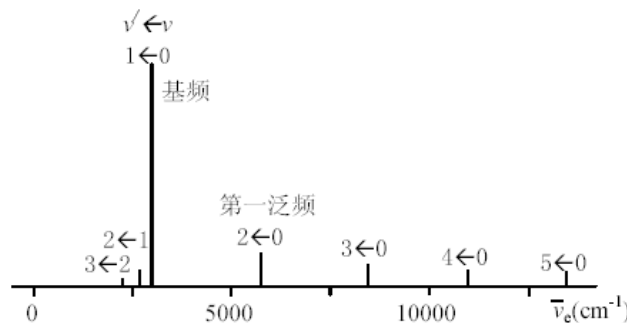


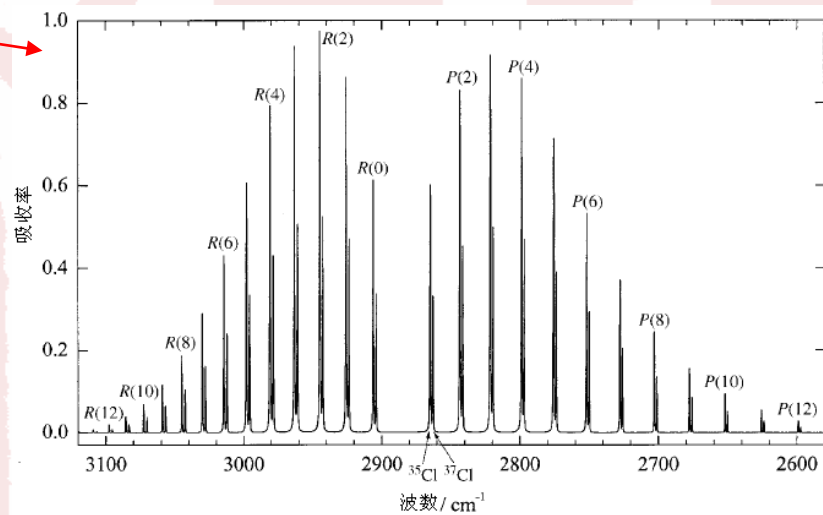
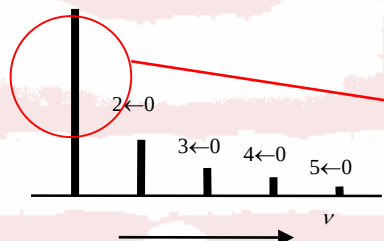
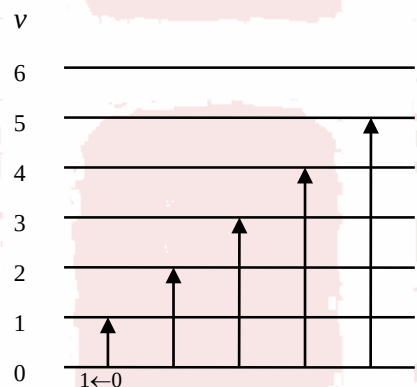
图 3.2.4 HCl^{35} 分子的振动吸收谱带系

跃迁 $v' \leftarrow 0$	$1 \leftarrow 0$	$2 \leftarrow 0$	$3 \leftarrow 0$	$4 \leftarrow 0$	$5 \leftarrow 0$
谱带位置(cm^{-1})	2886.194	5668.526	8347.199	10922.636	13395.204
谱带间隔(cm^{-1})		2782.332	2678.673	2575.437	2472.568

§ 4.2 分子光谱- 双原子分子红外振转光谱



Adv.At.Mol.Phys.



§ 4.2 分子光谱- 双原子分子红外振转光谱



Adv.At.Mol.Phys.

$(v', J') \leftarrow (v, J)$ 的跃迁

按照选择定则 $\Delta J = \pm 1$ 分为两支:

$\Delta J = +1$ R支

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}(v' \leftarrow v) + B'(J+1)(J+2) - BJ(J+1)$$

$$= \tilde{\nu}(v' \leftarrow v) + 2B' + (3B' - B)J + (B' - B)J^2$$

当 $B' \approx B$ 时, 有

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}(v' \leftarrow v) + 2B(J+1), \quad J = 0, 1, 2, \dots$$

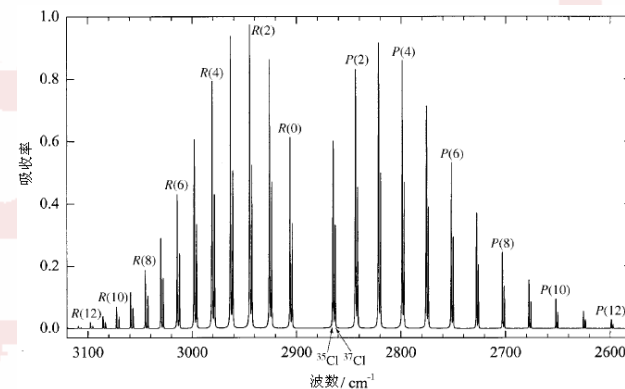
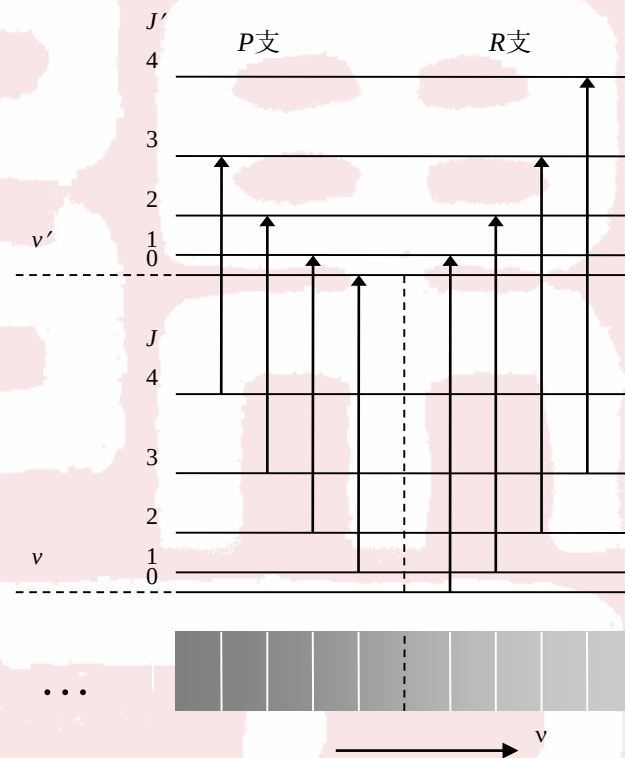
$\Delta J = -1$ P支

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}(v' \leftarrow v) + B'(J-1)J - BJ(J+1)$$

$$= \tilde{\nu}(v' \leftarrow v) - (B' + B)J + (B' - B)J^2$$

当 $B' \approx B$ 时, 有

$$\tilde{\nu} = \tilde{\nu}(v' \leftarrow v) - 2BJ, \quad J = 0, 1, 2, \dots$$



§ 4.2 分子光谱-双原子分子振转能级布居



Adv.At.Mol.Phys.

分子在不同能级上的布居

$$N_i = \frac{N_0 g_i e^{-E_i/kT}}{\sum_i g_i e^{-E_i/kT}}$$

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} e^{-(E_2 - E_1)/kT}$$

$$N_v = N_0 e^{-v h \nu / kT} / \sum_{v=0}^{\infty} e^{-v h \nu / kT} \approx \frac{N_0 h \nu}{kT} e^{-v h \nu / kT}$$

$$N_J \approx \frac{N_0 h c B_e}{kT} (2J+1) e^{-h c B_e J(J+1)/kT}$$

$$J_{\max} = \sqrt{\frac{kT}{2hcB_e}} - \frac{1}{2}$$

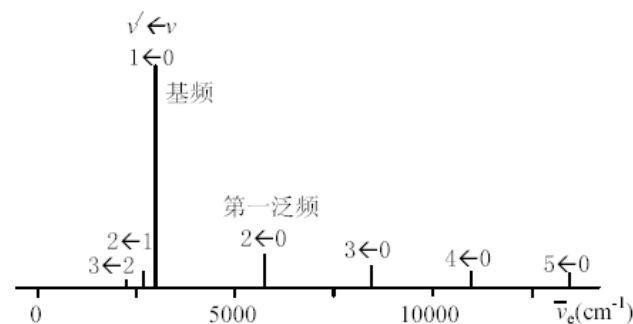


图 3.2.4 HCl^{35} 分子的振动吸收谱带系

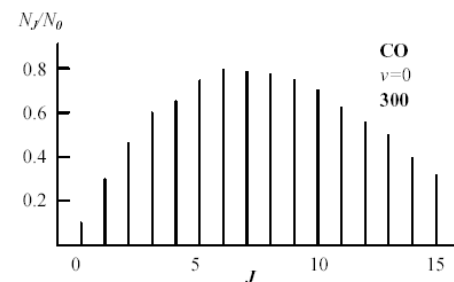


图 3.2.5 CO 分子基态纯转动吸收光谱