arXiv:2304.09492v1 [physics.atom-ph] 19 Apr 2023

短X射线脉冲对重类氢离子的电离中的相对论效应

O Novak、M Diachenko 和 R Kholodov

乌克兰国家科学院应用物理研究所，乌克兰苏梅市 Petropavlivska 街 58 号，邮编 40000

电子邮箱：novak-o-p@ukr.net

摘要。 本文在相对论微扰理论框架内计算了重类氢离子的光电离概率。通过采用狄拉克方程的相应解，准确考虑了重原子核的库仑势。将所得概率与非相对论极限以及基于数值求解含时狄拉克方程得到的非微扰结果进行了比较。在光子频率约为 $\hbar\omega \approx mc^2$ 时，次级电离通道中观察到电离抑制。

1. 引言

激光与物质相互作用长期以来备受关注，这得益于激光技术的显著进步 [1, 2, 3, 4]。现代激光设施能够达到超过束缚大多数原子内层电子的库仑场强度。预计正在建设的新一代激光设施将达到甚至超过临界薛温格场，从而能够观测电磁真空衰变等奇异现象。脉冲功率的提升与脉冲持续时间的缩短密切相关。目前，已有短至几个甚至单个光学周期的激光脉冲 [5, 6, 7]。此外，自由电子激光器项目还计划实现更高的光子能量。特别是，我们提及极端光基础设施 [8], 欧洲XFEL [9]以及反质子与离子研究设施 [10, 11, 12, 13]等项目。这些新进展要求基于相对论狄拉克方程，对原子过程进行完整的相对论处理。

本研究部分受到伽马工厂设施提案的启发，该提案目前正在欧洲核子研究中心讨论 [14]。伽马工厂基于一座配备高电荷态离子循环束流的高能储存环。激光设施产生的强光束将正面射向离子束。在离子束的静止参考系中，光子能量会提升 2γ 倍，从而能够激发离子的内层电子。受激离子继而发射次级光子；在实验室参考系中，这些光子主要沿离子束的传播方向发射。预计伽马工厂设施将提供一种硬光子源，其光子能量最高可达 400 keV，光子通量也将远远超过现代伽马射线源目前所能提供的水平。

重离子的内层电子所处的库仑场达到量子电动力学临界场的显著比例。这为探索量子电动力学中的各种基本问题提供了独特途径。然而，重离子的跃迁频率位于X射线波段，现代激光器无法达到。因此，在大多数实验中，人们利用各种碰撞过程来诱发重离子内层电子的跃迁。伽马工厂将使重离子的直接光谱学成为可能。

光电离是激光与物质相互作用中的关键过程之一，已有大量研究对其进行了探讨（综述见文献 [1, 2, 3, 4, 15] ）。文献 [16, 17], 在偶极近似下并考虑完整电磁势，研究了类氢离子的单光子和双光子光电离。文献 [18] 在偶极近似下采用数值方法研究了类氢系统的多光子光电离。文献 [19], 基于狄拉克方程的数值求解方法，研究了紫外脉冲作用下氢离子的阈上电离。文献 [20], 研究了超越偶极近似的包络诱导电离动力学。文献 [21, 22], 研究了氢和类氢离子的光电离，并考虑了对薛定谔方程的相对论修正。

纯数值方法受可用计算资源的限制，而电离概率对物理参数的依赖关系往往难以从数值结果中推断出来。另一方面，大多数解析方法都基于 Keldysh 的开创性工作，以及随后 F. Faisal 和 H. Reiss 的工作 [23, 24, 25]。在这种称为强场近似的方法中，原子势被视为电磁波强时变电场的微扰。在绝热极限下，光电离被描述为隧穿。例如，近期的一项研究 [26] 在 Göppert-Mayer规范下，采用修正的强场近似研究了恒定交叉电磁场中类氢原子或离子的相对论强场电离。

然而，当脉冲持续时间仅有几个光学周期且电场变化不满足绝热条件时，这些方法可能并不适用。

本文采用相对论微扰理论，计算重氢样离子的光电离概率。准确考虑库仑势，并将激光波视为微扰。这种方法对激光场强和强度有所限制。具体而言，激光场强必须小于束缚电子所受的典型库仑场。为确保微扰方法适用，本文所有解析结果均将激光场强设为库仑场强的百分之一。通过与非相对论极限以及基于含时狄拉克方程数值求解的非微扰计算进行比较，验证了解析结果的有效性。

使用相对论单位制， $\hbar = m = c = 1$，除非另有说明 .

2. 重离子光电离概率

在本研究中，我们将激光波视为微扰，而将原子核的库仑场置于相对论理论框架下处理。当激光的电场与基态电子所感受到的库仑电场强度处于同一数量级时，原子物理过程的行为预计会发生定性变化， E'。同样，激光光子能量的特征量可方便地选为与相应的束缚能同一数量级。因此，对于场强和光子频率，我们引入以下单位

$$\begin{aligned} \omega' &= 2\mathcal{E}_{bind}, \\ E' &= \frac{3Z\alpha}{\langle r^2 \rangle}, \end{aligned} \tag{1}$$

其中， α 是精细结构常数， $\mathcal{E}_{bind}$ 是束缚能， $\langle r^2 \rangle$ 是基态中电子径向坐标的均方值。请注意，当 $Z = 1$ 时， ω' 和 E' 与原子单位制相同；对于 $\mathcal{E}_{bind}$ 和$\langle r^2 \rangle$，则采用非相对论表达式。

利用已知的电子在一个场中的狄拉克方程解

点状核 核，可以得到 E' 和 ω' 的显式表达式，其形式为

$$\omega' = 2(1-\mathcal{E}_0),$$
$$E' = \frac{\alpha^{5/2}12Z^3}{(2\mathcal{E}_0+1)(2\mathcal{E}_0+2)}. \tag{2}$$

其中， $\mathcal{E}_0$ 为基态能量，

$$\mathcal{E}_0 = \sqrt{1-(\alpha Z)^2} \tag{3}$$

我们采用偶极近似，因此激光的磁场矢量为零，激光的电场矢量仅取决于时间，即 $E(t)$。在很宽的激光强度和频率范围内，在这一近似下计入的效应主导着物理过程。在强场区域内，当电磁波引起的电子位移小于波长和典型的电子轨道尺寸 $\langle r^2\rangle$ [1] 时，偶极近似是合理的。该条件可用有质动力势 $U_p = \alpha E^2/4\omega^2$ 表示为

$$U_p \ll 1, \qquad \frac{\alpha Z U_p}{\omega} \ll 1 \tag{4}$$

在本文中，我们考虑场强相对于临界场 E'较低、且激光频率与 ω'相当的情况。容易看出，这些数值满足不等式（4）。例如，对于激光脉冲 $E = 10^{-2}E'$ 和 $\omega \approx \omega'$ 引起类氢氡离子光电离的情况，我们得到 $U_p \sim 10^{-5}$ 和$\alpha Z U_p/\omega \sim 10^{-5}$。在此情况下，由强场效应导致偶极近似失效的典型激光强度可估算为 $I \sim 10^{29}$ W/cm^2 。

然而，在高频情况下，还需满足另一项要求。具体而言，电子轨道的尺寸 R_Z 应小于激光波长 λ [Vanne, Phys. Rev. A, 2012]。以氡离子为例，并取典型频率值 $\omega \approx \omega'$，可得 $R_Z/\lambda \approx 0.1$。我们将此估算视为所呈现结果中被忽略的非偶极贡献的预期大小。

为求得光电离概率，我们从点状原子核与激光波合成势的含时狄拉克方程出发，

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}\Psi. \tag{5}$$

在偶极近似下，激光脉冲的电场可用标势表示为

$$\phi = -E(t)z, \tag{6}$$

其中， E（t）为激光脉冲的含时电场。波偏振方向选为沿 Oz 轴，总动量在该轴上的投影 μ 守恒。因此，式 (5) 中的哈密顿量为

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + e\phi, \tag{7}$$

其中， $e = -\sqrt{\alpha}$ 是电子电荷，ˆ $\mathcal{H}_0$ 是点状原子核库仑势对应的未扰动哈密顿量，

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = \hat{\vec{\alpha}}\vec{p} + \hat{\beta} - \frac{Z\alpha}{r}. \tag{8}$$

这里，$\hat{}\,\hat{}\,\vec{\alpha}$ 和 β 是狄拉克矩阵，Z 是核电荷。

为求解方程（5），我们采用试探函数

$$\Psi = \sum a_{\mathbf{n}}(t)\Phi_{\mathbf{n}}e^{-i\mathcal{E}_{\mathbf{n}}t}, \tag{9}$$

其中，粗体索引表示量子数组。波函数 Φ_n满足方程

$$\hat{\mathcal{H}}_0\Phi_{\mathbf{n}} = \mathcal{E}_{\mathbf{n}}\Phi_{\mathbf{n}}. \tag{10}$$

将（9）代入方程（5），可得到以下关于振幅 $a_{\mathbf{n}}(t)$ 的耦合微分方程组，

$$i\dot{a}_{\mathbf{k}}(t) = \sum a_{\mathbf{n}}(t)e^{i(\mathcal{E}_{\mathbf{k}}-\mathcal{E}_{\mathbf{n}})t}V_{\mathbf{kn}}, \tag{11}$$

其中矩阵元 V_{kn} 定义为

$$V_{\mathbf{kn}} = \int d^{\,3}r\ \Phi^{+}_{\mathbf{k}}e\phi\ \Phi_{\mathbf{n}}. \tag{12}$$

我们将研究范围限定于从基态到正能连续谱的跃迁。因此，结合式（6），相应的矩阵元（12）可化为

$$V_{\varepsilon} = \sqrt{\alpha}E(t)z_{\varkappa}(\mathcal{E}), \tag{13}$$

$$z_{\varkappa}(\mathcal{E}) = \int d^3r\ \Phi^{+}_{\varepsilon\varkappa}z\Phi_0, \tag{14}$$

其中，下标 0 表示基态，$\mathcal{E}$ 为末态电子能量，$\varkappa$ 为由角动量 j 和态的宇称$(-1)^l$确定的自旋轨道量子数，

$$\varkappa = (-1)^{j+l+1/2}(j+1/2), \tag{15}$$

因此

$$l = \begin{cases} \varkappa, & \varkappa > 0, \\ -\varkappa - 1, & \varkappa < 0, \end{cases} \tag{16}$$

$$j = |\varkappa| - \frac{1}{2}. \tag{17}$$

注意，V_{ε} 可分解为空间部分和时间依赖部分。最后，对基态取 $a_0 \approx 1$，对所有其他态取 $a_{\mathbf{n}} \approx 0$，式（11）右侧的振幅可近似视为常数，从而得到一个简单的表达式

$$a_{\varkappa}(\mathcal{E}) \approx -i\sqrt{\alpha}\ z_{\varkappa}(\mathcal{E}) \int_{-\infty}^{+\infty} E(t)e^{i(\mathcal{E}-\mathcal{E}_0)t}\ dt, \tag{18}$$

其中 $\mathcal{E}_0 = \sqrt{1-(Z\alpha)^2}$是基态能量。注意，当满足条件 $\phi(t=\pm\infty) = 0$时，量 $a_{\varkappa}(\mathcal{E})$ 可解释为电离概率的振幅；否则，它包含描述恒定场中波函数形变的项。

为计算矩阵元 $z_\varkappa(\mathcal{E})$，我们使用已知的未扰动哈密顿量 (8) 的本征函数，

$$\Phi^{\mu}_{n\varkappa} = \frac{1}{r}\begin{pmatrix} G_{n\varkappa}(r)\chi^{\mu}_{\varkappa} \\ iF_{n\varkappa}(r)\chi^{\mu}_{-\varkappa} \end{pmatrix}. \tag{19}$$

这里，$G_{n\varkappa}(r)$ 和 $F_{n\varkappa}(r)$ 是实径向函数，$\chi^{\mu}_{\varkappa}$ 是球旋量，n 是主量子数，μ 是总角动量在 Oz 轴上的投影。

波函数 $\Phi^{\mu}_{n\varkappa}$ 描述具有确定电子能量 $\mathcal{E}_n$、总角动量 j、其投影 μ 和宇称 $(-1)^l$ 的电子态。对于处于基态的电子，量子数为

$$\varkappa_0 = -1, \qquad l_0 = 0, \qquad j_0 = 1/2. \tag{20}$$

由于问题的对称性，角动量投影守恒。因此，不失一般性，我们可以将初态和末态的 $\mu = 1/2$ 均设为该值。

根据公式 (19)，并注意到 $z = r\cos\theta$，矩阵元 (14) 可写为形式

$$z_\varkappa(\mathcal{E}) = g_\varepsilon \Omega_{\varkappa,\varkappa_0} + f_\varepsilon \Omega_{-\varkappa,-\varkappa_0}, \tag{21}$$

其中

$$\begin{aligned} g_\varepsilon &= \int_0^\infty G_{\varepsilon\varkappa} G_0 r\, dr, \\ f_\varepsilon &= \int_0^\infty F_{\varepsilon\varkappa} F_0 r\, dr, \end{aligned} \tag{22}$$

$$\Omega_{\varkappa,\varkappa'} = \int (\chi^{\mu}_{\varkappa})^{+} \chi^{\mu}_{\varkappa'} \cos\theta\, d\Omega. \tag{23}$$

角因子 $\Omega_{\varkappa,\ \varkappa'}$ 可以利用角动量代数轻松计算 [27],

$$\Omega_{\varkappa,\varkappa'} = (-1)^{\varphi}\Pi_{jj'll'}\begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -\mu & 0 & \mu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} l' & 1 & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{Bmatrix} l' & \frac{1}{2} & j' \\ j & 1 & l \end{Bmatrix}, \tag{24}$$

其中，圆括号和花括号中的矩阵分别表示 3j 符号和 6j符号，并且

$$\varphi = j + j' + l - l' - \mu + \frac{1}{2}, \tag{25}$$

$$\Pi_{a,b,\ldots} = \sqrt{(2a+1)(2b+1)\ldots} \tag{26}$$

考虑到 3j 和 6j 符号的选择定则以及公式（20），可以得出结论：只允许两组量子数的最终取值,

$$l = 1, \quad j = 3/2, \quad \varkappa = -2; \tag{27}$$

$$l = 1, \quad j = 1/2, \quad \varkappa = +1. \tag{28}$$

Th相应的角系数可通过直接计算获得 ,

$$\begin{aligned}\Omega_{-2,-1} &= \Omega_{+2,+1} = \frac{\sqrt{2}}{3},\\ \Omega_{+1,-1} &= \Omega_{-1,+1} = -\frac{1}{3}.\end{aligned} \tag{29}$$

为计算公式 (22) 给出的径向积分 g_ε 和 f_ε，我们使用库仑场 [28, 29]中电子的众所周知的波函数。如果电子占据基态，这些函数为

$$\begin{aligned}G_0 &= \sqrt{1+\mathcal{E}_0}N_0(2\zeta r)^{\gamma_0}e^{-\zeta r},\\ F_0 &= -\sqrt{1-\mathcal{E}_0}N_0(2\zeta r)^{\gamma_0}e^{-\zeta r},\end{aligned} \tag{30}$$

其中

$$\zeta = Z\alpha, \tag{31}$$

$$\gamma_0 = \sqrt{1-\zeta^2}, \tag{32}$$

$$N_0 = \sqrt{\frac{\zeta}{\Gamma(2\gamma_0+1)}}. \tag{33}$$

由式（30）给出的函数按以下方式归一化:

$$\int_0^\infty \left(G_0^2(r)+F_0^2(r)\right)\,dr = 1. \tag{34}$$

电子的末态属于正能连续谱。相应的波函数形式为 [28, 29]

$$\begin{aligned}G_{\varepsilon\varkappa} &= +\sqrt{\mathcal{E}+1}\,N(2pr)^{\gamma}\mathrm{Re}(\xi),\\ F_{\varepsilon\varkappa} &= -\sqrt{\mathcal{E}-1}\,N(2pr)^{\gamma}\mathrm{Im}(\xi),\end{aligned} \tag{35}$$

其中

$$\xi = e^{-ipr+i\eta}(\gamma+iy)F(\gamma+1+iy, 2\gamma+1, 2ipr), \tag{36}$$

$$e^{-2i\eta} = \frac{\gamma+iy}{-\varkappa+iy/\mathcal{E}}, \tag{37}$$

$$\gamma = \sqrt{\varkappa^2-\zeta^2}, \tag{38}$$

$$y = Z\alpha\mathcal{E}/p, \tag{39}$$

$$\mathcal{E} = \sqrt{1+p^2}. \tag{40}$$

我们假设连续谱波函数按以下方式归一化

$$\int \Phi^+_{\varepsilon\varkappa}\Phi_{\varepsilon'\varkappa'}d^3r = \delta_{\varkappa\varkappa'}\delta(\mathcal{E}-\mathcal{E}'). \tag{41}$$

在这种情况下，归一化常数 N 为

$$N = \frac{|\Gamma(\gamma+iy)|\,e^{\pi y/2}}{\sqrt{\pi p}\Gamma(2\gamma+1)}. \tag{42}$$

将（30）和（35）代入矩阵元（22），得到关于径向坐标 r 的如下形式的积分

$$J^{\nu}_{\alpha\beta} = \int\limits_0^{\infty} e^{-\lambda z} z^{\nu} F(\alpha, \beta, kz)\, dz. \tag{43}$$

该积分可以显式计算，并用高斯超几何函数 ${}_2F_1$ 表示:

$$J^{\nu}_{\alpha\beta} = \Gamma(\nu+1)\lambda^{-\nu-1}{}_2F_1(\alpha, \nu+1; \beta, \frac{k}{\lambda}). \tag{44}$$

考虑到（44）并进行简单变换，可得积分（22），

$$\begin{aligned} g_{\varepsilon} &= \sqrt{(\mathcal{E}+1)(1+\mathcal{E}_0)}\, A\ \mathrm{Re}\, B, \\ f_{\varepsilon} &= \sqrt{(\mathcal{E}-1)(1-\mathcal{E}_0)}\, A\ \mathrm{Im}\, B, \end{aligned} \tag{45}$$

其中

$$A = N_0 N (2\zeta)^{\gamma_0} (2p)^{\gamma} \Gamma(\gamma+\gamma_0+2), \tag{46}$$

$$\begin{aligned} &B = (\gamma+iy) e^{i\eta} (\zeta+ip)^{-(\gamma+\gamma_0+2)} \times \\ &\times {}_2F_1\left(1+\gamma+iy, \gamma+\gamma_0+2; 2\gamma+1; \frac{2ip}{\zeta+ip}\right). \end{aligned} \tag{47}$$

结合（29），矩阵元（21）可写为

$$z_{\varkappa}(\mathcal{E}) = \Omega_{\varkappa,-1}(f_{\varepsilon} + g_{\varepsilon}). \tag{48}$$

从基态电离到能量区间 $d\mathcal{E}$ 的概率为

$$dw_{\varkappa}(\mathcal{E}) = |a_{\varkappa}(\mathcal{E})|^2\, d\mathcal{E}. \tag{49}$$

最后，结合式（18）和（48），光电离微分概率可写为以下形式。

$$\frac{dw_{\varkappa}}{d\mathcal{E}} = \alpha \Omega^2_{\varkappa,-1} (g_{\varepsilon} + f_{\varepsilon})^2 \left| \int\limits_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{i(\mathcal{E}-\mathcal{E}_0)t}\, dt \right|^2, \tag{50}$$

其中，$\Omega_{\varkappa,-1}$ 的值由式（29）给出。对式（50）关于电子能量积分，即可得到总电离概率 $w_{\varkappa}$。

非相对论情形。非相对论情形下的计算与上述计算类似。然而，自旋和轨道角动量的守恒定律分别成立。因此，从基态发生光电离时，轨道角动量变化对应的允许通道只有一个

$$l_0 = 0 \quad \rightarrow \quad l = 1, \tag{51}$$

而其投影 m 和自旋分量 s_z 保持不变。此外，由公式 (43) 定义的积分 $J^{\nu}_{\alpha\beta}$可化为多项式，因此 z 的矩阵元可以用初等函数表示

[30]。由此得到的从基态到能量区间 $d\mathcal{E}$ 的非相对论光电离概率形式如下

$$\frac{dw}{d\mathcal{E}} = \alpha \frac{2^8 f(p/\zeta)}{3\zeta^4(1+(p/\zeta)^2)^5} \left| \int_{-\infty}^{t} E(t) e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2 , \tag{52}$$

其中 $\zeta = \alpha Z$ 和 $\omega_{fi} = (p^2 + \zeta^2)/2$。辅助函数 $f(x)$ 定义为

$$f(x) = \frac{\exp\left[-4\frac{\mathrm{arctg}(x)}{x}\right]}{1+\exp(-\frac{2\pi}{x})}. \tag{53}$$

众所周知，原子与外部电场相互作用时的薛定谔方程允许按核电荷进行尺度变换。例如，当激光频率和场强以如下定义的单位度量时，对于不同的 Z ，概率 (52) 保持不变

$$\begin{aligned} \omega' &= \alpha^2 Z^2, \\ E' &= \alpha^{5/2} Z^3. \end{aligned} \tag{54}$$

另一方面，相对论狄拉克方程在此类尺度变换下并不具有不变性。尽管如此，为了便于将式 (50) 与其非相对论对应式 (52) 进行比较，我们将分别采用式 (2) 和式 (54) 中的单位。

数值方法。为验证所得的微扰解析结果，我们将其与数值非微扰计算结果进行比较。为数值求解含时狄拉克方程，我们将含时波函数构造为如下形式

$$\Psi = \sum_{\mathbf{n}} c_{\mathbf{n}}(t) \varphi_{\mathbf{n}}. \tag{55}$$

出于性能考虑，此表达式与公式 (9) 类似，只是将因子 $e^{-i\mathcal{E}_{\mathbf{n}}t}$ 纳入了振幅 $c_{\mathbf{n}}(t)$中。基组波函数 $\varphi_{\mathbf{n}}$ 是狄拉克方程的解，描述电子在带电壳层模型下扩展原子核的库仑势中运动，

$$V_C = -\frac{\alpha Z}{\max(r, R_N)}, \tag{56}$$

其中 R_N 是原子核半径 [31]。未受扰动的波函数 ϕ_n 采用基于文献 [32, 19, 33]的变分方法计算得到。该技术使用由 B 样条构造的有限基组，并结合双动能平衡方法，以确保不存在伪解 [34]。

激光势的处理方式与解析方法类似。

将试探函数 (55) 代入狄拉克方程后，我们得到如下形式的常微分方程组

$$i\dot{c} = \tilde{M} c, \tag{57}$$

˜其中，矩阵 M 的各元素定义如下

$$\tilde{M}_{\mathbf{nk}} = \delta_{\mathbf{nk}}\mathcal{E}_{\mathbf{k}} + \sqrt{\alpha}E(t) < \varphi_{\mathbf{n}}|r\cos\theta|\varphi_{\mathbf{k}} > . \tag{58}$$

与微扰方法不同，我们不对振幅 $c_{\mathbf{n}}$ 的大小作任何假设，而是对方程组 (57) 进行数值求解。我们将时间划分为若干小区间˜Δt ，并将矩阵 M 近似为每个区间 Δt内的常数值。在这种情况下，方程 (11) 的解可写为

$$c(t + \Delta t) = e^{-i\tilde{M}\Delta t}c(t). \tag{59}$$

为避免直接计算矩阵指数（这可能会大量消耗计算资源），我们使用高效的 Lanczos 传播方法 [35]，求出每个时间区间内的振幅 $c(t)$。

计算出X射线脉冲结束时的振幅 $c_{\mathbf{n}}(t)$ 后，我们可以确定电离进入小能量区间 $[\mathcal{E}, \mathcal{E} + \Delta\mathcal{E}]$ 的概率：

$$\frac{dw(\mathcal{E}, \varkappa)}{d\mathcal{E}} = \frac{1}{\Delta\mathcal{E}} \sum_{n:\mathcal{E}_n \in \Delta\mathcal{E}} |c_{n\varkappa}|^2. \tag{60}$$

为计算波函数 $\varphi_{\mathbf{n}}$ ，我们在大小为$r_m \approx 300$ 原子单位的盒子中使用了500个B样条。为数值求解方程 (57)，我们选取了约3500个波函数Φ_n ，其本征能量位于区间 $[-1.0, 2.5]$ 内，且自旋轨道量子数满足条件 $|\varkappa| \leqslant 8$。

3. 结果

本节将比较由式（50）给出的光电离概率、非相对论微扰理论的结果以及数值计算结果。我们将激光脉冲的电场定义为

$$\vec{E}(t) = \vec{e_z}E_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right)\sin(\omega t), \tag{61}$$

其中， τ 为脉冲持续时间。我们将考虑持续时间为五个光学周期的短激光脉冲，$\tau = 5 \cdot 2\pi/\omega$。请注意，在相对论情形下，为计算式（50）给出的概率，我们按照（2）对激光频率和场强进行缩放；而在非相对论极限下，我们采用非相对论缩放（54）。

如式（50）所示，在微扰方法中，最大场强以独立因子 E_0^2的形式出现在光电离概率中。显然，式（50）仅适用于 E_0足够小的情形，此时总概率满足条件 $w_\varkappa \ll 1$。不失一般性，以下我们假设 $E_0 = 10^{-2}E'$ 。请注意，尽管激光场强仅设为库仑场 E'的一部分，但从实际角度看，它仍可视为极高。例如，氡离子的库仑场为 $E \approx 4.3 \cdot 10^{17}$ V/m，因此，场强 $10^{-2}E'$对应的激光强度为 $\sim 10^{24}$ W/cm^2。

图 1 展示了类氢氡离子的总光电离概率随激光频率的变化关系。该概率呈现出一个最大值

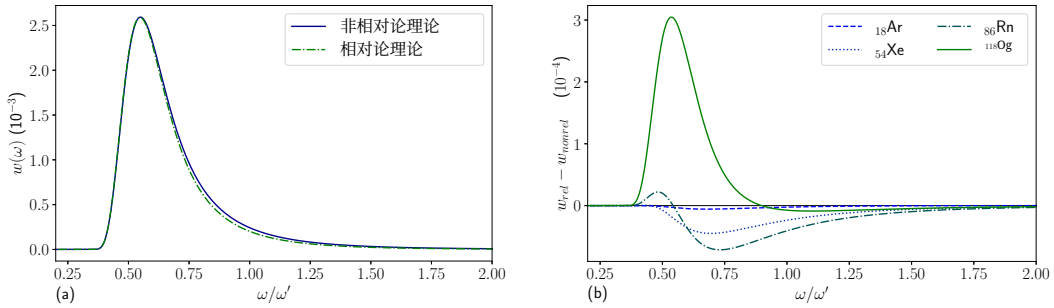


图1. (a) 氡$^{85+}$ 随激光频率变化的光电离概率。(b) 对于不同电荷值 Z，采用相对论和非相对论方法得到的电离概率之差。

接近 $\omega \approx \mathcal{E}_{bind}$ 值处，并且在低频方向下降得更加陡峭。请注意，在非相对论理论和偶极近似下，氢的光电离概率与具有原子序数 Z 的原子核的情形相同；此时激光频率和场强同时分别按 $\alpha^2 Z^2$ 和 $\alpha^{5/2} Z^3$ 缩放（以相对论单位表示）。一般而言，与缩放后的非相对论结果相比，相对论效应会抑制电离概率。然而，这主要是因为束缚能、平均径向坐标值，以及因此电子所感受到的库仑场，相较于非相对论缩放具有更陡峭的依赖关系。采用由相对论表达式给出的 $\mathcal{E}_{bind}$ 和 $\langle r^2 \rangle$ 进行缩放（1），即可计入这一效应。文献 [18], 中介绍了类似方法，其中引入了有效电荷 Z'。因此，不同化学元素的光电离概率差异，远小于采用非相对论缩放时的差异。同时，这种差异呈现复杂的非单调变化，且正负交替。所有 Z 均如此，图 1(b) 中氡离子的曲线可见这一点。当 Z 增大时，曲线的极大值向差异为正的区域移动。

与非相对论方法相比，公式 (50) 可以提取关于具有不同总角动量 j 和量子数 $\varkappa$ 的两个电离通道 (27) 、 (28) 的信息。相应的图示见图 2。

具有 $\varkappa = -2$ 的主通道的概率可以较为准确地进行缩放，并且在定性上再现非相对论结果。另一方面，具有 $\varkappa = +1$ 的电离通道呈现出一个局部极小值。该极小值位于以通常单位表示的频率值 $\hbar\omega \approx mc^2$ 附近。具有 $\varkappa = -2$ 的通道中不存在这一特征。

通道 $\varkappa = +1$ 中光电离概率的抑制现象，在光电离概率随核电荷 Z 的变化关系中也表现得十分明显（图 3）。

为阐明这种抑制的起因，我们来考察式（50）中的因子（$g_\varepsilon + f_\varepsilon$）。若 $\varkappa = -2$, 所示因子是电子

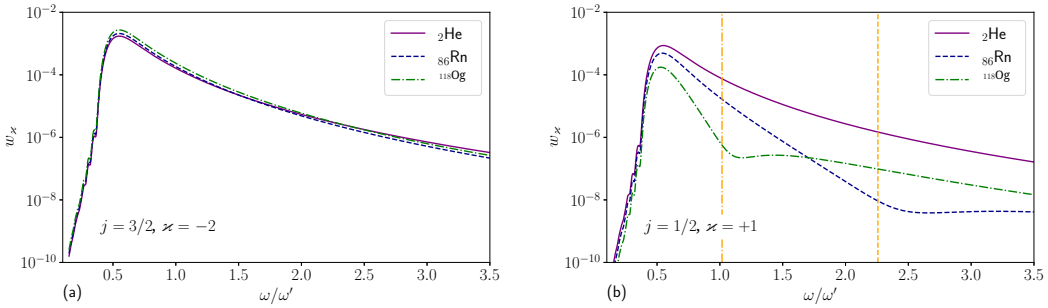


图 2. 氢样离子$_2$He^{1+}、$_{86}$Rn^{85+} 和$_{118}$Og^{117+} 的光电离概率随激光频率的变化，针对两种可能的电离通道。竖线表示$_{118}$Og^{117+} 和$_{86}$Rn^{85+} 对应的激光频率值 $\omega = mc^2/\omega'$ 。

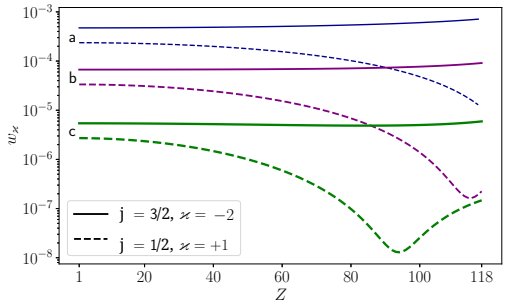


图 3. 重离子的光电离概率随核电荷的变化，激光频率取不同值：(a) $\omega = 0.8\omega'$，(b) $\omega = 1.2\omega'$，(c) $\omega = 2.0\omega'$。

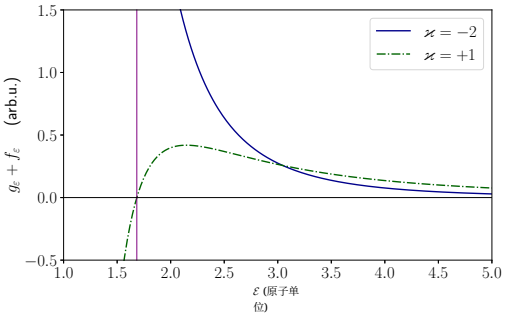


图 4. 量$(g_\varepsilon + f_\varepsilon)$随电子能量的变化， $Z = 86$。竖线位于 $\mathcal{E}^* = 1 + \mathcal{E}_0$

能量 $\mathcal{E}$，且始终不为零。另一方面，当 $\varkappa = +1$ 时，该因子在能量值

$$\mathcal{E}^* = 1 + \mathcal{E}_0. \tag{62}$$

对于 $Z = 86$ 的情况，这一性质如图 4 所示。

在 同时，在微扰情形下，最可能的电子跃迁

对应于电离至.....附近的能量范围

$$\mathcal{E}_m \approx \mathcal{E}_0 + \omega. \tag{63}$$

因此，若 $\omega \approx 1$则 $\mathcal{E}_m = \mathcal{E}^*$，因子 $(g_\varepsilon + f_\varepsilon)$ 因而概率 $dw_\varkappa(\mathcal{E})$ 在贡献最大的能量范围内消失。这会导致通道 $\varkappa = +1$ 中的概率抑制。

图 5 显示了激光脉冲电离$_{86}\mathrm{Rn}^{85+}$ 的能谱，激光频率为 $\omega = 1.0\omega'$ ($\hbar\omega \approx 0.44mc^2$)，且 $\omega = 2.5\omega'$ ($\hbar\omega \approx 1.1mc^2$)。第一种情况下，$\mathcal{E}^* > \mathcal{E}_m$，次级通道的抑制不存在，其中 $\varkappa = +1$。第二种情况下，激光频率对应于图 2 和图 3 中极小值的位置，此时条件 $\mathcal{E}^* \approx \mathcal{E}_m$ 成立。

图 5 所示电离能谱的一个显著特征是其振荡背景。这源于过程概率（50）中的时间积分，

$$I = \left| \int E(t) e^{-i\omega_{fi} t} dt \right|^2, \tag{64}$$

其中 $\omega_{fi} = \mathcal{E} - \mathcal{E}_0$。为定性说明这一行为，我们注意到，激光脉冲（61）的电场可用谐函数表示。因此，积分结果中包含组合频率的谐函数，例如 $I \propto \sin(\omega \pm \omega_{fi} \pm \nu_p)\tau$ 等，其中 ν_p 是与脉冲包络相关的某个频率。显然，这些函数相对于电子能量 $\mathcal{E}$ 的振荡周期与脉冲持续时间 τ成反比。事实上，图 5 所示的两种情况下，X 射线脉冲都具有相同数量的光学周期。因此，在频率较高的情况下，振荡间隔更宽。

我们将式（50）给出的微扰概率与数值计算的电离能谱进行了比较。

如图所示，次级通道中具有 $\varkappa = +1$ 的特征得到了非微扰计算的证实。不过需要指出的是，数值结果和微扰结果都是在激光势的偶极近似下得到的。因此，这一特征是否纯粹是偶极效应，还是在非偶极处理中也会出现，仍需进一步研究。

除了自旋轨道量子数取值为 $\varkappa = -2$和 $\varkappa = +1$的偶极跃迁外，非微扰数值处理还使我们能够计算微扰理论中禁阻跃迁的概率。图 5 中，灰色曲线表示自旋轨道量子数为 $\varkappa \neq -2$ 和$\varkappa \neq +1$的电离通道的总概率密度。可以看出，在所考虑的条件下，这些通道的总贡献可以忽略不计。不过，在电离谱的高能部分，其贡献可能较为显著。

4. 结论

在本研究中，我们建立了一种相对论微扰方法，用于研究短时强激光脉冲引起的重离子 K 壳层光电离。为描述电子

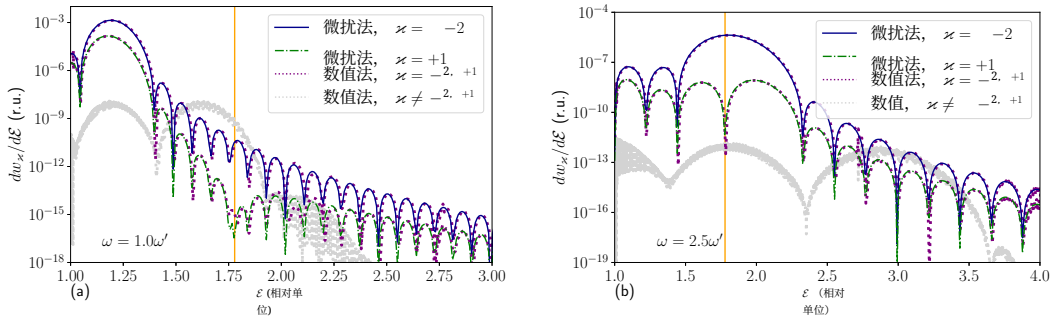


图5. 在微扰理论和数值计算框架下获得的a $_{86}\mathrm{Rn}^{85+}$ 离子光电离电子谱。(a) 激光频率为 $\omega = 1.0\omega'$；(b) 激光频率为 $\omega = 2.5\omega'$ （或 $\omega \approx 1.1$）。竖线位于 $\mathcal{E}^* = \mathcal{E}_0 + 1$处。

运动方面，我们采用狄拉克方程的解，而激光势则在偶极近似下作为库仑哈密顿量的微扰加以考虑。在这种方法中，从基态电离至连续态允许两条通道，它们的总角动量 j 和自旋轨道量子数 $\varkappa$ 取值不同。对于这两条通道，微分电离概率可写成简单的解析形式。

相对论效应主要与重离子中的电子运动有关。因此，对激光参数进行相对论标度变换后，可以较高精度地将总概率转换为非相对论结果。同时，在光子能量约为 $\hbar\omega \approx mc^2$时，观察到末态电子具有角动量 $j = 1/2$ （以及$\varkappa = +1$）的电离受到抑制。这一效应纯粹源于相对论，并通过电离谱的非微扰数值计算得到证实。

致谢

本研究部分获得乌克兰国家科学院资助，项目编号为 0117U001760，隶属于定向研究计划“高能物理与核物理高级国际项目合作”。

[1] H. R. Reiss. Progress in Quantum Electronics 1992, 第16卷，第1–71页[2] Y. I. Salamin、S. X. Hu、K. Z. Hatsagortsyan、C. H. Keitel。Physics Reports 427（2006）41–155。[3] A. Di Piazza、C. Müller、K. Z. Hatsagortsyan 和 C. H. Keitel。Reviews of Modern Physics，第84卷，2012年。[4] D. B. Milošević、G. G. Paulus、D. Bauer 和 W. Becker。Journal of Physics B: 原子、分子与光学物理 39（2006）R203–R262。[5] T. Brabec 和 F. Krausz，*Reviews of Modern Physics*，第72卷，第545页，2000年。[6] A. Baltuska 等，*Nature*，第421卷，第611页，2003年。[7] R. Lopez-Martenz 等，*Physical Review Letters*，第94卷，033001，2005年。[8] O. Tesileanu、D. Ursescu、R. Dabu、N. V. Zamfir。Journal of Physics: Conference Series 420，012157（2013）。[9] M. Altarelli、R. Brinkmann、M. Chergui 等。欧洲X射线自由电子激光器。技术设计报告。德国电子同步加速器报告编号 DESY 2006-097，2007年。[10]《概念设计报告：国际离子束与反质子束加速器设施》，W. Henning 编，GSI，达姆施塔特，德国，2001年。

[11]A. Gumberidze、F. Bosch、A. Bräuning-Demian 等，《核仪器与方法：物理研究》B辑，第233卷，第28页，2005年。[12] Th. Stöhlker、T. Beier、H. F. Beyer 等，《核仪器与方法：物理研究》B辑，第235卷，第494页，2005年。[13] A. Gumberidze、Th. Stöhlker、H. F. Beyer 等，《核仪器与方法：物理研究》B辑，第267卷，第248页，2009年。[14] D. Budker 等，《物理学年鉴》第532卷，2000204，2020年。[15] D. Dimitrovski。《强短电脉冲引起的电离与激发的时间依赖性》，博士论文，弗赖堡大学，2005年。[16] M. S. Pindzola、J. A. Ludlow 和 J. Colgan。Physical Review A，第81卷，063431，2010年。[17] M. S. Pindzola、Sh. A. Abdel-Naby、F. Robicheaux 和 J. Colgan。Physical Review A，第85卷，032701，2012年。[18] Yu. Vanne 和 A. Saenz。Physical Review A，第85卷，033411，2012年。[19] S. Selstø、Eva Lindroth 和 Jakob Bengtsson，Physical Review A，第79卷，043418，2009年。[20] A. Simonsen、T. Kjellsson、M. Førre、E. Lindroth 和 S. Selstø，Physical Review A，第93卷，053411，2016年。[21] A. Dondera 和 H. Bachau。Physical Review A，第85卷，013423，2012年。[22] H. Bachau、O. Budriga、M. Dondera 和 V. Florescu。《中欧物理学杂志》，第11卷，第1091页，2013年。[23] L. V. Keldysh，《苏联物理学杂志：实验与理论物理》，第20卷，第1307页，1965年。[24] F. H. M. Faisal，Journal of Physics B，第6卷，第L89页，1973年。[25] H. R. Reiss，Physical Review A，第22卷，第1786页，1980年。[26] A. Eckey、M. Klaiber、A. B. Voitkiv 和 C. Müller。电子预印本 arXiv:2212.06440。[27] D. A. Varshalovich、A. N. Moskalev、V. K. Khersonskii。《角动量的量子理论》。World Scientific，1988年。[28] W. Greiner、B. Müller 和 J. Rafelski。《强场量子电动力学》。Springer-Verlag，柏林、海德堡，1985年。[29] V. B. Berestetskii、E. M. Lifshitz 和 L. P. Pitaevskii。《相对论量子理论》。牛津：Pergamon，1982年。[30]L. D. Landau、E. M. Lifshitz。《量子力学：非相对论理论》。Butterworth-Heinemann，2003年。[31] I. Angeli、K. P. Marinova，《原子数据与核数据表》，第99卷，第69–95页，2013年。[32] W. R. Johnson、S. A. Blundell、J. Sapirstein，Physical Review A，第37卷，第2期，第307页，1988年。[33] S. R. McConnell、A. N. Artemyev、M. Mai、A. Surzhykov，Physical Review A，第86卷，052705，2012年。[34] V. M. Shabaev、I. I. Tupitsyn、V. A. Yerokhin、G. Plunien 和 G. Soff。Physical Review Letters，第93卷，第13期，130405，2004年。[35] T. J. Park 和 J. C. Light，Journal of Chemical Physics，第85卷，第5870页，1986年。