

强场高次谐波的一维短程势模拟

李学信 徐至展 胡素兴 韩申生

(中国科学院上海光机所, 上海 201800)

提要 通过数值求解一维短程势含时薛定谔方程, 研究了不同频率激光作用下, 原子的电离几率、束缚态粒子数布居和谐波辐射随激光强度的变化。结果表明, 谐波次数和强度随原子电离几率的增大而增加, 基态粒子数布居与电离几率之间具有反比关系, 都呈现出强烈振荡的性质。结果表明, 高次谐波主要是从连续态到基态的跃迁产生的。

关键词 强场高次谐波, 一维短程势模型, 光电离

强场高次谐波是强场物理的重要研究内容之一, 是实现 XUV 和软 X-射线的重要方法^[1,2], 同时, 也是唯一可行的实现亚飞秒激光脉冲的重要手段^[3]。目前, 利用高次谐波已得到了 6.7 nm 的相干辐射光^[4], 比 K. C. Kulander 理论预言的光子能量还要高^[5]。如何正确理解谐波的产生过程是进一步提高转换效率和光子能量的关键。我们通过数值求解一维含时薛定谔方程发现, 如果把原子的空间网格取得较大, 在同样的条件下, 理论计算值小于实验上观察到的光子能量, 原因是当原子的空间较大时, 电子可以在距原子核较远的地方出现, 而这些电子回到核附近的机会较小, 因此难以产生高次谐波。如果用短程势模型进行计算, 同样能量的电子, 由于只能在原子核附近运动, 回到基态的几率较大, 能够产生较强的高能光子, 这是采用短程势模型的原因之一, 另外人们认为基态在谐波辐射中起主要作用, 用短程势模型时, 只有两个束缚态, 因此可用来检验基态在谐波辐射中的作用。在谐波产生过程中, 电子是否在原子核周围振荡, 也是人们研究的主要问题之一。我们利用一维短程势模型, 在中等激光强度附近 ($5 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$) 计算了原子的电离几率、高次谐波辐射以及束缚态粒子数布居, 讨论了它们之间的联系。

1 一维短程势模型以及含时薛定谔方程的数值解

对线偏振光, 用一维势模型是合理的, 同时也是方便的。计算中选取势的表达式为 $V(x) = -\frac{e^{-\gamma|x|}}{\sqrt{1+x^2}}$, 其中 $\gamma = 0.5$, 可以看出只有在 $x = 0$ 的附近, 库仑势才有较大的影响。采用原子单位和单电子近似, 将得到如下的定态薛定谔方程:

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{e^{-\gamma|x|}}{\sqrt{1+x^2}} \right) \psi(x) = \varepsilon \psi(x) \quad (1)$$

其中, ε 为本征能量。通过数值求解方程(1), 可以得到一系列本征能量 ε_n 和本征波函数值 $\psi_n(x)$, 求得的本征能量如图 1 所示, 共有 2 个束缚态和 998 个分离的连续态, 两个束缚态是由

短程势模型决定的,分离的连续态数是为求光电子能谱选取的,能量间隔越小,选取态数目越多,得到的光电子能谱越精确,而对谐波辐射无关,原因见后。内插图为 2 个束缚态和最初 8 个连续态的能级,基态能量为 -0.47 a. u. 。

在外激光场 $E(t) = E \times f(t)\sin\omega t$ 的作用下,含时薛定谔方程为

$$i \frac{\partial \psi(t, x)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{e^{-|x|}}{\sqrt{1+x^2}} + xE f(t)\sin\omega t \right] \psi(t, x) \quad (2)$$

其中 $f(t)$ 为脉冲包络,可以根据情况选取,在我们的计算中有如下形式

$$f(t) = \begin{cases} \sin^2 \frac{t\pi}{2t_1} & 0 \leq t \leq t_1 \\ 1 & t_1 < t < t_2 \\ \sin^2 \frac{(t_3 - t)\pi}{2(t_3 - t_2)} & t_2 \leq t \leq t_3 \end{cases} \quad (3)$$

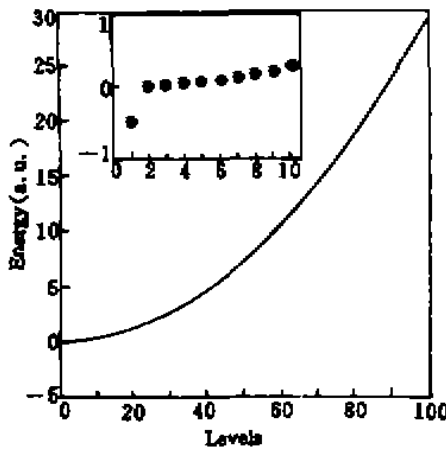


图 1 两个束缚态和 998 个分离连续态的本征能量,插图是两个束缚态和 8 个初始分离连续态的能量

Fig. 1 Eigenstate energy of the two bound states and 998 discretized continua, the inserted graph is the energy for the two bound states and the first 8 discretized continua

这样选取的原因是,任何真实脉冲都有上升沿和下降沿,一般可用高斯形式或正弦平方表示,同时为了强调某一激光强度的影响,我们引入了一个稳定振幅段,由于采用短程势模型,这意味着激光场与原子的作用时间必须较短,一般为几十个飞秒量级,这也是后面的计算中分别取三部分各为 5 个周期共 15 个光周期的原因。求解的方法是利用前面求出的基态波函数 $\psi_0(x)$ 作初始条件,然后数值求解方程(2),可以得到各个时刻总的波函数 $\psi(x, t)$,根据求得的波函数 $\psi(t, x)$ 可以得到电偶极矩的期待值 $d(t_j) = \sum_i \psi^*(t_j, x_i) x_i \psi(t_j, x_i) \delta x$,其中 t_j 和 x_i 分别为数值计算中的第 j 个时间点和第 i 个空间点, δx 为空间步长。对 $d(t_j)$ 进行傅里叶变换就可得到光辐射振幅 $d(\Omega) = \sum_j d(t_j) e^{-i\Omega t_j} \delta t$, δt 为时间步长。而 $|d(\Omega)|^2$ 就是相应的光谱强度,由于利用波包法求总波函数,因此所取连续态数目对谐波计算无影响。如果想求电子在各个能级上出现的几率,可以把波函数

展开为定态波函数的线性叠加,即

$$\psi(t, x) = \sum_n C_n(t) |\psi_n(x)\rangle \quad (4)$$

把(4)代入(2)可得到一系列关于 $C_n(t)$ 的耦合方程,利用已求得的定态波函数 $\psi_n(x)$,通过数值求解,可得到 $C_n(t)$ 的数值解, $|C_n(t)|^2$ 为在 t 时刻电子在能级 ϵ_n 上出现的几率。

2 计算结果

我们分别对 $\omega = 0.056$ 和 $\omega = 0.112$ 两种频率的入射光进行了计算,计算时,脉冲宽取为 15 个周期,上升沿和下降沿各有 5 个周期,中间稳定振幅期间为 5 个光周期,谐波计算是在稳

定振幅期间进行的,原子电离和束缚态粒子数布居是在整个作用时间内计算的,得到了完全相似的结果。对 $\omega = 0.056$ 的入射激光,在不同强度下的电离几率、束缚态粒子数布居和谐波辐射分别如图 2~图 4 所示。

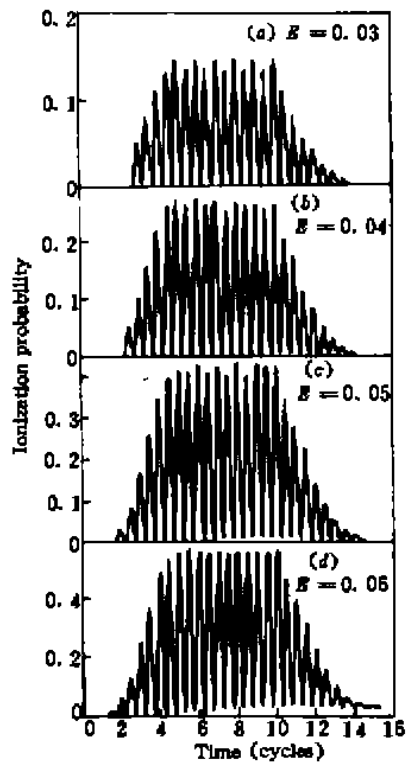


图 2 $\omega = 0.056$ 时原子在不同激光强度下的电离几率分布

Fig. 2 Ionization probability distribution of atom under several laser intensities for $\omega = 0.056$

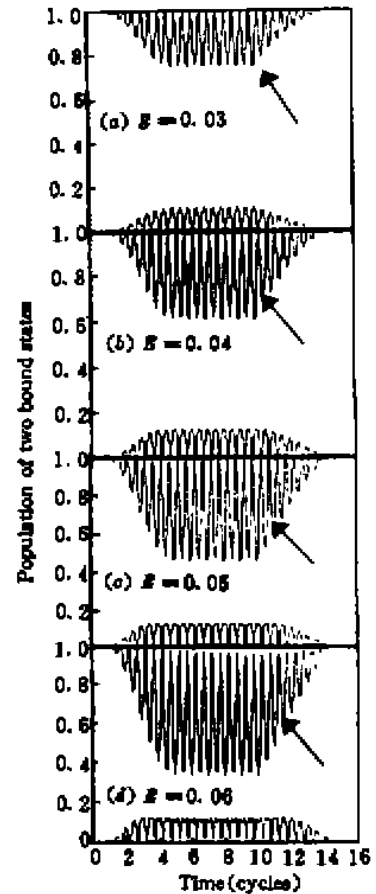


图 3 $\omega = 0.056$ 时两个束缚态在不同激光强度下的布居

Fig. 3 The population of the two bound states under several laser intensities for $\omega = 0.056$

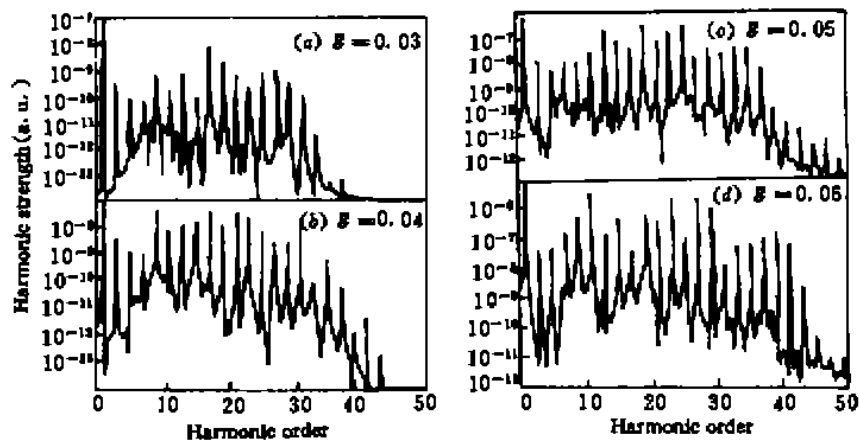


图 4 $\omega = 0.056$ 时原子在不同激光强度下的谐波谱

Fig. 4 Harmonic spectra of atom under several laser intensities for $\omega = 0.056$

3 讨 论

由图 2 可以看出,随着激光强度的增加,原子的电离几率逐渐增大,电离几率的分布具有多光子电离特性,即电离几率较小,而且随时间的增加上升缓慢。激光强度处于 0.03 到 0.06 原子单位之间,继续增加激光强度将无法得到归一化的波函数,这也说明这个短程势模型只适用于多光子电离区。由图 3 对应的束缚态粒子数布居可以看出,基态(箭头所示)粒子数布居随着激光强度的增加而减小,比较图 2 和图 3,原子的电离几率和基态粒子数布居都具有明显的振荡特性,但变化趋势相反。这说明电子在某时刻从外激光场吸收能量,从基态跃迁到连续态,在另外一时刻从连续态跃迁回到基态而把多余的能量以光子的形式释放出来,从而产生谐波。谐波谱如图 4 所示,可以看出,随着激光强度的增加,谐波谱中的平台区和信号强度均逐渐增加,这也说明在我们计算的激光强度范围内,原子的电离有利于谐波辐射。由图 4(d)可以看出,当 $E = 0.06$ 时,高次谐波的转换效率在 10^{-7} 附近,与文献[4]中的 10^{-6} 转换效率相近,对高强度的入射光而言(10^{13} W/cm^2),产生的高次谐波具有兆瓦级功率,而且实验上已证明其具有较好的时空相干性,偏振方向与入射光相同,可能成为拍摄 X 射线全息图的重要光源^[4]。综上所述,我们认为,高次谐波是由连续态到基态的跃迁产生的,适当的电离有利于谐波辐射,实验中如能合适地控制工作条件,通过谐波法一定能得到实用的极紫外相干光源。

参 考 文 献

- 1 J. J. Macklin, J. D. Kmetec, C. L. Gordon. III. High order harmonic generation using intense femtosecond pulses. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, 70(6): 755~759
- 2 A. L'Huillier, P. Balcou. High order harmonic generation in rare gases with a 1-ps 1053 nm laser. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, 70(5): 774~777
- 3 C. J. Joshi, P. B. Corkum. Interactions of ultra intense laser light with matter. *Phys. Today*, 1995, 5(1): 35
- 4 P. A. Norreys, M. Zepf, S. Moustazis *et al.*. Efficient XUV harmonics generated from picosecond laser pulse interactions with solid targets. *Phys. Rev. Lett.*, 1995, 78(11): 1832~1835
- 5 J. L. Krause, K. J. Schafer, K. C. Kulander. High order harmonic generation from atoms and ions in the high intensity regime. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, 68(24): 3535~3538

The One-dimension-short-range-potential Model of High Order Harmonic Generation

Li Xuexin Xu Zhizhan Hu Suxing Han Shensheng

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800)

Abstract By solving the one dimension short range time dependent Schrodinger equation, the ionization probability, population of bound states and harmonic spectra of atom under different laser intensities are studied. It shows that the ionization of atom is good for harmonic generation. Harmonic emission is generated from the jump of electrons from continuum states to the ground state, both the ionization and population are oscillating, but with different directions.

Key words strong field high order harmonic generation, one dimension-short range potential model, photoionization