

阈上电离与高次谐波

李学信 徐至展

(中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

摘 要 通过数值求解一维含时薛定谔方程, 研究了阈上电离与高次谐波随激光强度的变化关系。结果表明, 两者具有相同的特性, 都具有平台区和截止位置, 但两者又有差别。较低激光强度作用下, 谐波谱有平台而光电子能谱为单调下降的, 激光强度较高时, 两者都有平台, 对应的平台区和截止位置相同。

关键词 一维含时薛定谔方程, 阈上电离, 高次谐波。

1 引 言

阈上电离是人们发现的第一个不能用微扰论解释的现象^[1], 起初是通过测量离子产物来研究原子的电离过程的, 这是一种宏观结果, 只有当电子谱仪出现以后, 人们才可以真正记录原子的电离过程, 即记录光电子能谱, 结果发现, 电离后的电子可继续吸收光子, 从而得到多峰光电子能谱, 当激光强度较弱时, 光电子能谱呈单调下降趋势, 与微扰论预言的结果相同, 当激光强度较高时, 光电子能谱不再单调下降, 具有平台。与这种多光子电离过程相关的是光辐射, 特别是谐波辐射^[2~5], 由于两者要求的实验条件不同, 到目前为止还没有实验能够同时测量阈上电离和高次谐波, 只能进行理论研究。通过数值求解一维含时薛定谔方程, 研究了阈上电离与高次谐波随激光强度的变化关系, 得到的结果既不同于 Kulanter 等人用三维模型得到的结论^[6], 也不同于 Eberly 等人用一维模型得到的结论^[7], 其结论为两者同时具有平台区和截止位置, 原因是电子在某些连续态上出现的几率越大, 其回到原子基态的几率也越大, 两者是相同的。作者的结论是, 两者可以具有平台也可以具有截止位置, 但两者不一定同时具有平台和截止位置, 并定性解释了它们之间的联系。

2 计算方法和计算结果

一维势的形式取为 $V(x) = -1/\sqrt{1+x^2}$, 有了一维势的表示式, 则可得定态薛定谔方程(原子单位)为:

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{\sqrt{1+x^2}}\right)\Psi(x) = \epsilon\Psi(x) \quad (1)$$

对该方程进行数值求解, 利用通常的三点公式把二阶导数化为微分形式, 可求得基态能量为

- 0.66982 a. u., 把连续态取成准连续态, 最大连续态能量为 29 a. u., 这样就可以得到一系列本征能量和一系列波函数值。在外激光场 $E(t) = E f(t) \sin \omega t$ 作用下, 其中 $f(t)$ 为脉冲包络, 可以根据情况选取, 在本文的计算中有如下形式:

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

有外场时的薛定谔方程为:

$$i \frac{\partial \Psi(t, x)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} + x E f(t) \sin \omega t \right] \Psi(t, x) \quad (3)$$

求解的方法是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)式代入(3)式可得到一系列关于 $C_n(t)$ 的耦合方程, 然后进行数值求解, 就可以得到 $C_n(t)$ 的值, $|C_n(t)|^2$ 为在 t 时刻电子在能级 n 上出现的几率。根据求得的波函数 $\Psi(t, x) = \sum_n C_n(t) | \Psi_n(x) \rangle$ 可以得到电偶极矩的期待值 $d(t) = \langle \Psi(t, x) | x | \Psi(t, x) \rangle$, 对 $d(t)$ 进行傅里叶变换就可得到光辐射振幅 $d(\omega)$, 而 $|d(\omega)|^2$ 就是相应的光谱强度, 光电子能谱是在激光作用结束时, 根据电子在连续态上出现的几率求得的。本文对 $\omega = 0.112$ 频率的入射光进行了计算, 计算时, 脉冲宽取为 10 个周期, 上升沿有 4 个周期, 稳定振幅期间为 6 个光周期, 谐波计算是在稳定振幅期间进行的, 光电子能谱是在整个作用时间内计算的, 不同激光强度下的光电子能谱分布和谐波辐射分别如图 1 和图 2 所示。

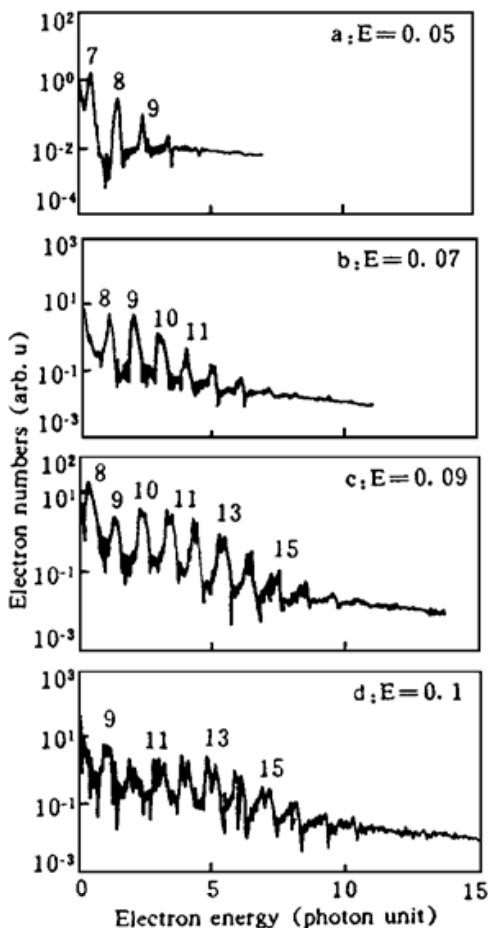


Fig. 1 The photoelectron energy spectra of atom under several laser intensities for $\omega = 0.112$

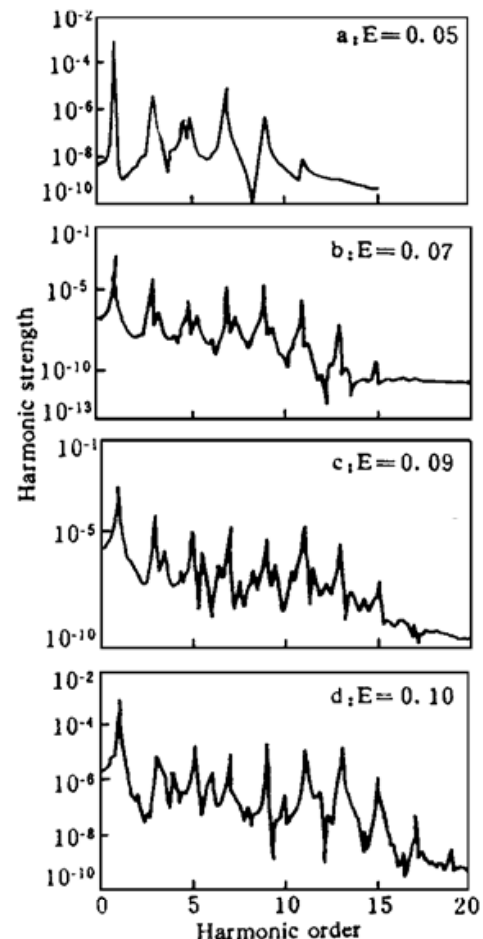


Fig. 2 The harmonic spectra of atom under several laser intensities for $\omega = 0.112$

3 讨 论

由图 1(a)可以看出, 当 $E = 0.05$ 时, 光电子能谱几乎呈单调下降趋势, 只能得到前四级明显的光电子峰, 对于 $\omega = 0.112$ 的入射光和电离能为 0.67 的原子, 正好为 6 光子电离, 在外场作用下, 电离能级的移动由电子在外场中的平均抖动动能 $E_p = E^2/4\omega^2$ 决定, 对 $E = 0.05$ 、0.07、0.09 和 0.1 的外场, 电离能级的移动分别为 0.0498、0.0977、0.1614 和 0.199, 分别需要 6.4、6.9、7.5 和 7.8 个光子才能引起电离, 因此, 对 $E = 0.05$ 的外场, 光电子能谱中的第一个峰应是 7 光子吸收引起的, 由于所需能量为 6.4 个光子, 因此第一个光电子峰的位置在第一个光子能量之前, 同样对 $E = 0.07$ 的外场, 光电离需要约 7 个光子能量, 由图 1(b)可以看出, 第一个峰应是 8 光子电离峰, 而且峰的位值正好是光子能量的整数倍, 同时 7 光子电离通道关闭, 这时的光电子能谱也呈单调下降趋势, 可以看出直到 11 光子吸收都有较大的强度, 虽然也出现了第 15 光电子能谱, 但非常弱。由图 2 对应的谐波谱可以看出, 这时谐波辐射已有平台区的出现(5~11 次谐波), 最高谐波次数为 15 次, 和光电子能谱具有一一对应关系, 但前者是单调下降的而后者具有平台。对 $E = 0.09$ 的入射光, 光电子能谱具有平台出现, 而且光电子能谱的峰值不再对应光子能量的整数倍, 作者认为这是由于激光场诱导原子能级移动引起的, 对应的第一个峰仍是 8 光子吸收引起的, 但光电子峰继续前移, 可以看出从 9 光电子峰到 13 光电子峰形成了平台, 到 17 光子都有峰值出现, 而对应的谐波平台区为 5 到 13 次谐波, 最高次为 17 次, 与光电子能谱几乎具有完全相同的分布形式, 可以看出高阶光电子能谱都分裂为两个峰, 作者认为这是由激光场诱导原子能级分裂产生的。对 $E = 0.1$ 的入射光, 这时需约 8 个光子方可引起电离, 因此 8 光电子能谱继续前移, 对应图 1(d)中的零光子能谱位置, 可以看出, 从 9 光电子峰到 14 光电子峰形成了平台, 最高为 18 光电子能谱, 而对应的谐波平台区为 5 到 15 次谐波, 最高次为 19 次, 和光电子能谱几乎具有完全相同的分布形式, 可以看出光电子能谱都分裂更为严重。由图 1 可以得出, 随着激光强度的增加, 光电子能谱中的各阶峰逐渐前移, 直到低阶峰消失, 这是外场引起能级移动的结果, 而且光电子能谱分布从单调下降逐步过渡到平台区出现。低强度时光电子能谱分布不同于谐波分布, 高强度时两者分布相似。这可理解为较低强度下谐波辐射已具有较高的非线性, 而对光电子能谱而言, 必须在高强度下才具有较强的非线性。这种不同激光强度下光电子能谱和谐波辐射谱的分布特性表明, 两者之间具有联系也有区别, 联系是两者都与多光子电离有关, 都与电子在连续态上出现的几率相联系, 光电子能谱在光子能量的整数倍出现峰值, 说明电子在这些能级上出现的几率较大, 当这些电子回到基态时刚好产生对应的谐波, 所以两者之间的峰具有一一对应关系, 不同的是光电子能谱是电子在连续态上出现的几率, 而谐波是由从连续态到基态的跃迁决定的, 应该说, 从实验的角度来看, 光电子能谱是由远离作用区的电子决定的, 而谐波是由那些回到基态的电子决定的, 两者应是一种相互竞争的过程, 由于这里只是理论上的计算, 没有和真正的实验条件相联系, 因此, 无法和实验结果相比较。

参 考 文 献

- [1] P. Agostini, P. Breger, A. L'Huillier *et al.*, Free-free transitions following six-photon ionization of

- atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 1979, **42**(17): 1127~ 1130
- [2] 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
- [3] K. Burnett, P. L. Knight, B. R. M. Piraux *et al.*, Suppression of ionization in strong laser fields. *Phys. Rev. Lett.*, 1991, **66**(3): 301~ 304
- [4] J. J. Macklin, J. D. Kmetec, C. L. Gordon III., High order harmonic generation using intense fs pulses. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, **70**(6): 766~ 769
- [5] A. L'Huillier, P. Balcou., High order harmonic generation in rare gases with a 1 ps 1053 nm laser. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, **70**(6): 774~ 777
- [6] K. J. Schafer, B. R. Yang, L. F. Dimauro *et al.*, Above threshold ionization beyond the high harmonic cutoff. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, **70**(11): 1599~ 1602
- [7] J. H. Eberly, Q. Su, J. Javanainen., Nonlinear light scattering accompanying multiphoton ionization. *Phys. Rev. Lett.*, 1989, **62**(8): 881~ 884

Above Threshold Ionization and High Order Harmonic Generation

Li Xuexin Xu Zhizhan

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

(Received 24 January 1996; revised 11 March 1996)

Abstract By solving the 1-dimensional time-dependent-Schrodinger-equation, the above threshold ionization (ATI) and high order harmonic generation (HOHG) of atom under different laser intensity are obtained, and the relation between the ATI and HOHG is discussed. The results show that under higher laser intensity, both the ATI and HOHG have plateau and cutoff, but under lower laser intensity, the HOHG has plateau and the ATI decreases monotonically.

Key words 1-dimensional-time-dependent-Schrodinger-equation, ATI and HOHG.