

两能级原子强场谐波的数值求解

李学信 腾华国 徐至展 韩申生 黎 忠

(中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

摘 要 通过数值求解强激光场作用下两能级原子的含时间薛定谔方程得到了单原子辐射谱, 并与解析解得到的单原子谐波谱进行了比较。

关键词 强场谐波, 含时薛定谔方程的数值求解, 单原子辐射谱.

1 引 言

强激光场高次谐波是强场物理的主要研究内容之一, 它不仅能帮助人们认识强激光场与物质相互作用的本质, 而且是产生短波长激光及 X 射线的主要手段之一。实验观察到的强场谐波谱中, 有一个转换效率较高的平台区^[1,2,3], 正是这个平台区的出现才使得产生的高次谐波具有真正的实用价值。如何正确理解和解释这个现象是进一步改善实验条件, 获得高转换效率高次谐波的关键。求解原子发射谱的出发点为原子在外场作用下的薛定谔方程, 由于外激光场较强, 不能作微扰处理, 因此, 无法求出薛定谔方程的解析解。除了少数几个近似解析解外^[4,5], 只能进行数值求解。强外场作用下薛定谔方程的数值求解主要有两类, 一类是 Burnett 等人的一维含时间薛定谔方程数值求解^[6], 另一类为 Kulander 等人的三维含时间薛定谔方程数值求解^[7], 虽然三维的比较真实, 而一维的也同样给出了强场谐波的主要特征。以上两种方法都需要大量的计算时间。作者曾在文献[4]中利用两能级原子模型解析地求得了单原子谐波谱, 本文进行了数值求解, 结果表明, 两种方法得到的结果相似, 给出了强场谐波谱的主要特征, 与前述两种数值法相比, 具有计算简单、所需时间较短等优点, 但由于所取能级较少, 只能给出谐波的主要特征, 而不能把计算结果和实验数据进行定量比较, 是一种近似理论。

2 两能级原子薛定谔方程的数值求解

本文采用两能级原子模型, 其中一个能级为基态 $|a\rangle$, 另一个为近电离态 $|b\rangle$, 对应的能量分别为零和 E_b , 外激光场作用下原子的薛定谔方程为(原子单位):

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x, t) = (H + xE_0 \cos \omega t) \varphi(x, t) \quad (1)$$

方程的解为两个本征态的线性叠加,

$$\varphi(x, t) = a(t)|a\rangle + b(t)|b\rangle \quad (2)$$

把方程(2)代入方程(1), 并利用 $|a\rangle$ 、 $|b\rangle$ 的正交归一化条件, 可以得到如下两个方程:

$$\frac{\partial}{\partial t} a(t) = -iXb(t)\cos\omega t \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} b(t) = -iE_b b(t) - iXa(t)\cos\omega t \quad (4)$$

式中 $X = E_0\langle a|x|b\rangle = E_0\langle b|x|a\rangle$ 为与外激光场电场分量振幅有关的拉比频率, $a(t)$ 、 $b(t)$ 分别为原子处于 $|a\rangle$ 和 $|b\rangle$ 两态的几率振幅。而电偶极矩的含时期待值 $d(t)$ 为:

$$d(t) = \langle \varphi(x, t) | x E_0 | \varphi(x, t) \rangle = X[a^*(t)b(t) + C. C] \quad (5)$$

单原子辐射谱的获得是通过求解 $d(t)$ 的傅里叶分量 $d(q\omega) = \int d(t)e^{-iq\omega t} dt$, 而 $|d(q\omega)|^2$ 对应的就是不同频率处的辐射强度分布。由此可以看出, 只要能求出原子在 $|a\rangle$ 、 $|b\rangle$ 两态出现的几率振幅 $a(t)$ 和 $b(t)$, 就可以求出相应的原子辐射谱。由(3)式、(4)式可以看出, $a(t)$ 和 $b(t)$ 是通过外场 $E_0\cos\omega t$ 耦合在一起的, 无法求出 $a(t)$ 和 $b(t)$ 的具体解析表达式。为此, 进行了数值计算, 把 $a(t)$ 和 $b(t)$ 对时间的一阶微分化为差分形式, 也就是把作用时间分成许多很短的时间间隔 t_0, t_1, \dots, t_n , 假设原子最初位于基态 $|a\rangle$, 利用初始条件 $a(t_0) = 1$ 和 $b(t_0) = 0$, 就可以求出各个时刻的 $a(t_m)$ 和 $b(t_m)$,

$$a(t_m) = a(t_{m-1}) - ihXb(t_{m-1})\cos\omega t_{m-1} \quad (6)$$

$$b(t_m) = b(t_{m-1}) - ih[E_b b(t_{m-1}) + a(t_{m-1})X\cos\omega t_{m-1}] \quad (7)$$

式中 h 为时间步长。任一时刻 t_m 的电偶极矩含时期待值 $d(t_m)$ 和原子辐射谱 $|d(q\omega)|^2$ 为:

$$d(t_m) = X[a^*(t_m)b(t_m) + C. C] \quad (8)$$

$$|d(q\omega)|^2 = \left| \sum_{m=0}^n h d(t_m) e^{-iq\omega t_m} \right|^2 \quad (9)$$

上式已把积分化为求和的形式。这里所取的 q 值为从 0 开始, 每间隔 0.1 取一值, 一直取到 35, 这样就可以看到当 q 为非奇整数时原子的辐射谱。整个计算程序用 Fortran 语言编写, 在 486 微机上运行, 运行时间约 30 min, 具体时间与所取参数有关。

3 数值计算结果与解析解的比较

图1和图2为在同样参数条件下 ($E_b = X = 10\omega$), 分别由数值解法和解析法得到的单原

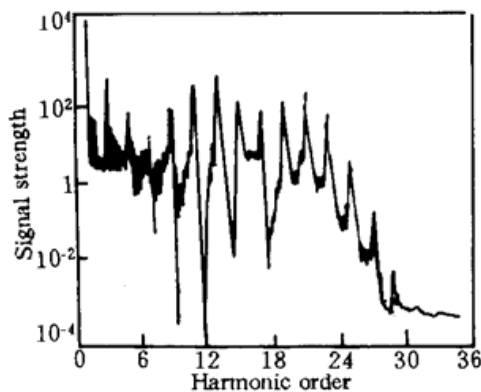


Fig. 1 Single atom emission spectrum of numerical calculation

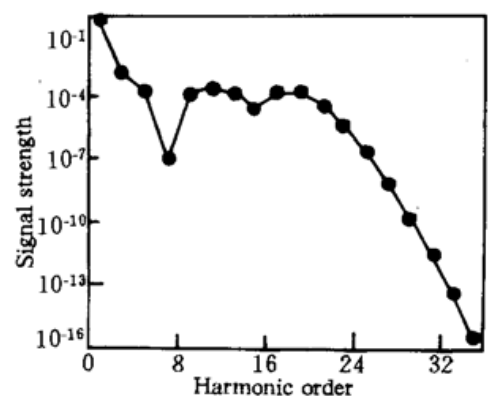


Fig. 2 Harmonic spectrum of analytical calculation. from Ref [4]

子辐射谱^[4], 可以看出两者的相对分布完全相似, 首先, 从第一次谐波到第7次谐波都是单

调下降, 然后, 从第 9 次谐波到第 23 次谐波形成一个平台区, 随后一直单调下降。数值求解的结果表明, 各个奇次谐波确实具有较大的信噪比, 也就是说各次奇次谐波的强度分布远远大于其周围的辐射, 而且带宽较小, 是一种强相干辐射过程。

结 论 虽然用数值法和解析法得到了相同的单原子辐射谱分布, 但必须指出的是, 用解极法求解有很大的局限性。首先, 必须假设外场具有 $\cos \omega t$ 形式而不能采用 $\sin \omega t$ 形式, 否则, 无法得到解析的递推公式, 其次, 无法考虑激光脉冲宽度和脉冲具体分布形式的影响, 而只能作方脉冲处理。本文给出的数值解法, 不仅能解决上述困难, 而且还能用来研究双色场及多色场作用下的单原子辐射谱。关于这方面的工作作者将另文讨论。

参 考 文 献

- [1] N. Sarukura, Coherent soft X-ray generation by the harmonic of an ultrahigh-power KrF laser. *Phys. Rev(A)*, 1991, **43**(3): 1669~1672
- [2] J. J. Macklin, J. J. Macklin, High-order harmonic generation using intense femtosecond pulses. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, **70**(6): 766~769
- [3] A. L'Huillier, High-order harmonic generation in rare gases with a 1-ps 1053 nm laser. *Phys. Rev. Lett.*, 1993, **70**(6): 774~777
- [4] 李学信, 徐至展, 黎忠等, 强激光场高次谐波的二能级原子模型. *光学学报*, 1996, **16**(5): 592~594
- [5] Luis Plaja, Adiabatic theory for high-order harmonic generation in a two-level atom. *J. Opt. Soc. Am. (B)*, 1992, **9**(2): 2210~2213
- [6] V. C. Reed, K. Burnett, Ionization of atoms in intense laser pulses using the Kramers-Henneberger transformation. *Phys. Rev. (A)*, 1990, **42**(5): 3152~3155
- [7] J. L. Krause, Calculation of photoemission from atoms subject to intense laser fields. *Phys. Rev. (A)*, 1992, **45**(7): 4998~5010

Numerical Solution of Two-Level-Atom Harmonics Under Strong Laser Field

Li Xuexin Teng Huaguo Xu Zhizhan Han Shensheng Li Zhong
(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800)

(Received 3 July 1995; revised 23 August 1995)

Abstract The single atom emission spectrum was obtained by solving numerically the time-dependent Schrödinger equation of two-level atom under strong laser field. The result was compared with that of the analytical calculation.

Key words strong field harmonic generation, the numerical solution of time-dependent Schrödinger equation, single atom emission spectrum.