

文章编号 : 1001-4322(2005)12-1824-05

双色场中氦离子高次谐波的保结构算法研究及应用*

祁月盈^{1,2}, 刘世兴^{2,3}, 刘晓艳^{2,4}, 李平雪^{2,5}, 丁培柱²

(1. 嘉兴学院 机电工程学院,浙江 嘉兴 314001; 2. 吉林大学 原子与分子物理研究所,吉林 长春 130012; 3. 辽宁大学 物理系,辽宁 沈阳 110036; 4. 东北师范大学 数学系,吉林 长春 130024; 5. 北京工业大学 物理系 北京 100022)

摘 要 : 通过数值求解含时 Schrödinger 方程,研究了氦离子在不同双色场下的高次谐波。结果显示,尽管管频光强度仅为基频光的 1/10,高次谐波辐射却发生了极大变化。虽然谐波级次推进不多,但效率大大提高了,平台区平均提高 10³ 倍,高倍频光对应的高次谐波产生效率提高 10⁴ ~ 10⁵ 倍。氦离子在添加倍频光的双色场作用下高次谐波产生效率极大提高的原因是:倍频光极大地加快了电子电离到连续态及返回基态这一过程,使辐射出的高次谐波光子数大大增加,该初步阐释可为高次谐波真正应用到实际中提供一些理论启示。

关键词 : 双色场; 高次谐波; 辛算法

中图分类号 : O562 文献标识码 : A

近几十年来特别是上个世纪末,激光技术尤其短脉冲强激光技术获得飞速发展,实验室已可获得强度高达 10²⁰ W/cm² 的激光脉冲,这使得激光与物质相互作用成为物理、化学、生物与材料科学诸领域成为活跃的前沿基础研究课题。强激光场与原子(分子、离子)相互作用产生高次谐波是产生真空远紫外线与软 X 射线以及从飞秒(10⁻¹⁵ s)激光脉冲向阿秒(10⁻¹⁸ s)激光脉冲转换的可能途径,所以研究高次谐波已成为当前强激光场中最具活力的研究方向和极具挑战性和诱惑力的课题之一^[1]。国内的研究也很活跃,做出了很多卓有成效的工作^[2-5]。本文将通过数值求解含时 Schrödinger 方程,来研究氦离子在不同双色场下的高次谐波。

1 理论模型与数值方法

研究强激光尤其短脉冲强激光与原子(分子、离子)相互作用,由于场强已接近甚至超过原子库仑势,传统的微扰论已不再适用。含时 Schrödinger 方程包容了原子(分子、离子)、激光场及原子(分子、离子)与激光场相互作用的全部物理内容,从而直接求解含时 Schrödinger 方程以研究强激光与原子(分子、离子)相互作用成为一条合理、自然的途径,日益受到人们的重视^[6-8]。

在激光场作用下,原子(分子、离子)中的电子在激光电场方向上受到的作用远大于其它方向。从而,1 维模型能够很好地描述激光与原子(分子、离子)的相互作用,也使得问题大大简化。求解强激光与原子相互作用的 1 维模型归结为求解含时 Schrödinger 方程的无穷空间初值问题

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0(x) + \mathcal{E}(t)x \right] \Psi(x, t), \quad 0 < t \leq T, -\infty < x < +\infty \quad (1)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1, \quad 0 < t \leq T \quad (2)$$

$$\Psi(x, 0) = \varphi(x), \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 dx = 1, \quad -\infty < x < +\infty \quad (3)$$

式中 $\mathcal{E}(t)x = E_0 f(t)x \sin(\omega_0 t)$ 是激光与原子相互作用势, $f(t)$ 是激光脉冲包络,如 $f(t) = \sin^2 \omega t$ 型激光脉冲; E_0 是激光场的电场强度峰值; $V_0(x)$ 是原子势; T 为激光场的宽度。若采用软核势^[8], 则对于 1 维氢原子, $V_0(x) = -1/\sqrt{x^2 + 2}$; 对于 1 维类氢氦离子, $V_0(x) = -2/\sqrt{x^2 + 1/2}$ 。

1.1 渐近边界条件的推导^[10]

当 $|x|$ 充分大(如 $|x| \geq X_0$) 时, $|V_0(x)| \ll |V(x, t)|$, $\Psi(x, 0) = \varphi(x) = 0$ 。方程(1)略去 $V_0(x)$ 得

$$i \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}(x, t) = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, t) \right] \tilde{\Psi}(x, t), \quad 0 < t \leq T, -\infty < x < +\infty \quad (4)$$

* 收稿日期 2005-01-31; 修订日期 2005-07-10

基金项目 国家自然科学基金资助课题(10074019, 10171039); 国家重大基础研究专项经费资助课题(G1999032804)

作者简介 祁月盈(1976—)女, 陕西西安人, 博士, 讲师, 主要从事强激光场原子与分子物理中的保结构算法与应用的研究; E-mail: qi_yuying@yahoo.com.cn.

$$\dot{Z} = GZ + JY = JCZ + JY, \quad C = \begin{bmatrix} S & 0 \\ 0 & S \end{bmatrix} \quad G = \begin{bmatrix} 0 & S \\ -S & 0 \end{bmatrix} \quad J = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{bmatrix} \quad (15)$$

很明显 S 和 C 是实对称矩阵, $G = JC$ 是无穷小辛矩阵, J 是标准辛矩阵。

从 (13) 式看出, 这是一个可分 Hamilton 系统且 Hamiltonian 显含时间, 因此可采用 Hamiltonian 显含时间的可分 Hamilton 系统的辛格式^[13]数值求解正则方程 (14)。

将上述两步综合起来就是采用渐近边界条件计算强激光场中 1 维模型原子的保结构算法。数值计算得到近似含时波函数, 即可计算强激光场中 1 维模型原子的电离几率和高次谐波。

2 计算结果与讨论

采用上面的理论模型和数值方法计算了 1 维模型氢原子的高次谐波^[14], 计算所得的谐波谱截止位置与按截止规则所算值相符, 说明采用保结构算法计算强激光场中原子分子动力学行为是可靠和有效的。

采用同样的过程数值计算了强激光场中 1 维模型类氢氦离子的高次谐波。结果显示, 在一定的激光强度 $E_0 = 0.336 \text{ au}$, 脉冲宽度 $T = 5 \text{ fs}$ 下, 类氢氦离子可能产生很高次 (500 次) 的高次谐波, 如图 1(a); 但是谐波转化效率太低, 与实际应用相差太远。理论和实验都指出, 添加高倍频光 ($\omega_1 = n\omega_0$) 的双色激光场可提高高次谐波的产生效率^[15, 16]。

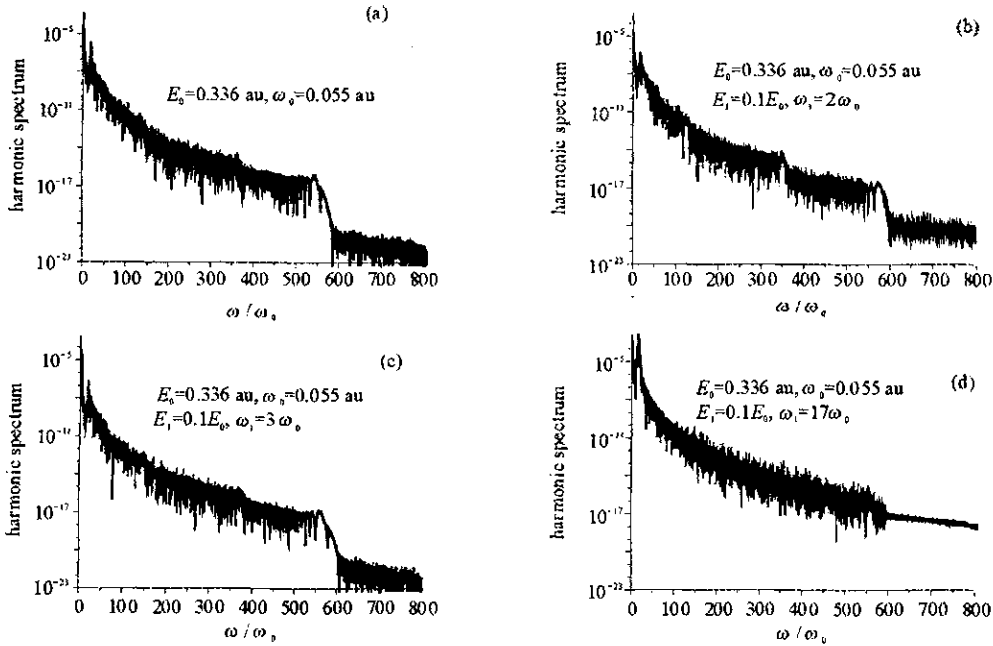


Fig. 1 Harmonic spectrum irradiated by different laser field

图 1 不同激光场中的谐波谱

在我们的数值实验中, 激光场中添加 2 倍、3 倍 (基于基频光 ω_0) 的倍频光和 17 倍等高倍频光计算了氦离子的高次谐波, 结果如图 1(b~d)。计算结果显示, 尽管倍频光的强度 (E_1) 仅为基频光的 1/10, 但是平台区却平均提高了 $10^3 \sim 10^4$ 倍, 高倍频光对应级次的高次谐波提高 $10^4 \sim 10^5$ 倍甚至更高。我们的计算结果表明 (1) 在双色场作用下基态电子的布居几率较单色场时整体下降, 即电子电离的几率增大, 如图 2 所示 (2) 添加倍频光使电子在第 1 激发态的布居几率增大, 电子向偶宇称连续态跃迁的通道更加畅通, 如图 3、图 4 所示 (3) 支持了已有的理论解释^[2, 15]。特别地, 我们的计算还进一步阐释了添加倍频光可以极

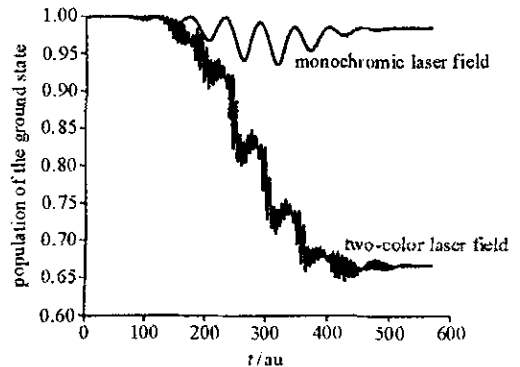


Fig. 2 Probabilities of He^+ ground state irradiated by both of monochromatic laser field ($\omega_0 = 0.055 \text{ au}$) and two-color ($17\omega_0$) laser field

图 2 He^+ 在单色场与双色场作用下基态电子的布居几率

大地提高高次谐波产生效率的原因 添加倍频光极大地加快了电子电离到连续态及再返回基态这一过程 如图 2~4 所示。依据高次谐波产生的量子理论^[17] 辐射出的高次谐波光子数大大增加,使得高次谐波的产生效率极大地提高。

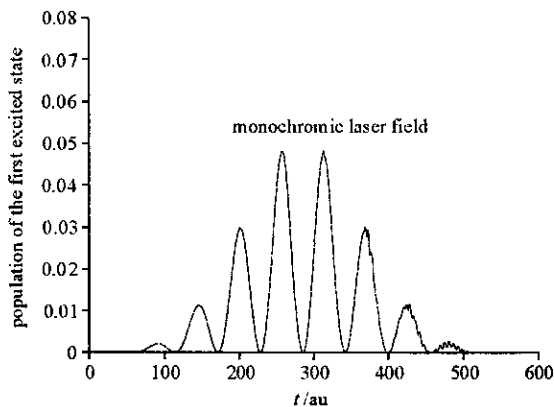


Fig.3 Probabilities of He⁺ first excited state irradiated by the monochromatic laser field $\omega_0 = 0.055\text{au}$

图3 (a) He⁺ 在单色场 $\omega_0 = 0.055\text{au}$ 作用下
第一激发态电子的布居几率

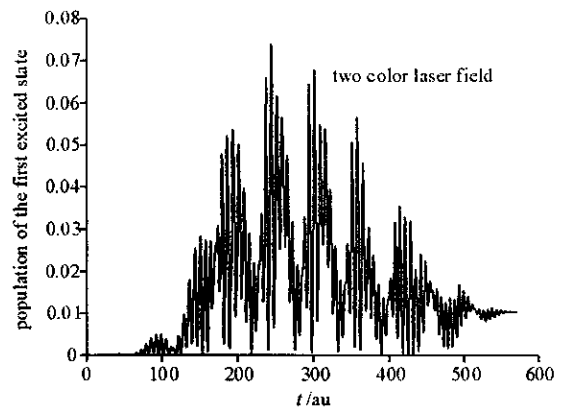


Fig.4 Probabilities of He⁺ first excited state irradiated by the two-color laser field $\omega_1 = 17\omega_0$

图4 He⁺ 在双色场 $\omega_1 = 17\omega_0$ 作用下
第一激发态电子的布居几率

参考文献：

- [1] 张杰. 强场物理——一门崭新的学科[J]. 物理, 1997, **26** :643. (Zhang J. Strong-field physics—a brand-new subject. *Phys*, 1997, **26** :643)
- [2] 胡素兴,徐至展. 强激光啁啾脉冲中的高次谐波辐射[J]. 光学学报, 1998, **18** (7) :851. (Hu S X , Xu Z Z. High-harmonic radiation in the chirped-pulse strong laser. *Acta Opt Sinica*, 1998, **18** (7) :851)
- [3] Xu Z Z , Wang Y S , Zhai K , et al. Direct experimental evidence of influence of ionizations on high-order harmonic generation[J]. *Opt Commun*, 1998, **158** (1) :89.
- [4] Hu S X , Xu Z Z. Dynamics of an intense laser-driven multiwell system : a model of ionized clusters[J]. *Phys Rev A*, 1997, **56** (5) :3916.
- [5] 陈黎明,张杰,余玮,等. 产生短波长高次谐波条件的优化计算[J]. 强激光与粒子束, 1999, **11** (6) :705. (Chen L M , Zhang J , Yu W , et al. Excelled calculation about the condition of high harmonic generation. *High Power Laser and Particle Beams*, 1999, **11** (6) :705)
- [6] Qu W X , Gan M L , Xia Y X , et al. Two-color effect on the ionization and harmonic generation of one-dimensional He⁺[J]. *Chin Phys Lett*, 2001, **18** :1047.
- [7] Ermolaev A M , Puzynin I V , Selin A V , et al. Integral boundary conditions for the time-dependent Schrödinger equation : atom in a laser field[J]. *Phys Rev A*, 1999, **60** (6) :4831.
- [8] Taïeb R , Vénierd V , Maquet A. Theory of two-color pump-probe determination of ionization dynamics[J]. *Phys Rev A*, 1998, **57** (6) :R4098.
- [9] Liu W C , Clark C W. Closed-form solutions of the Schrödinger equation for a model one-dimensional hydrogen atom[J]. *J Phys B*, 1992, **25** :1517—524.
- [10] 祁月盈,刘晓艳,丁培柱. 强激光场中一维原子的渐近边界条件[J]. 计算物理, 2003, **20** (5) :377—380. (Qi Y Y , Liu X Y , Ding P Z. One-dimensional atom asymptotic boundary condition in the strong laser field. *Comp Phys of Chin*, 2003, **20** (5) :377—380)
- [11] Rosenberg L , Zhou F. Generalized Volkov wave functions : application to laser-assisted scattering[J]. *Phys Rev A*, 1993, **47** :2146.
- [12] Heading J. An introduction to phase integral method[M]. London : Methuen and Co , 1962.
- [13] 刘晓艳,刘学深,丁培柱. 时间相关外场中量子系统的辛算法[J]. 计算物理, 2003, **20** (2) :127—129. (Liu X Y , Liu X S , Ding P Z. Symplectic integrators in quantum systems with time-dependent external fields. *Comp Phys of Chin*, 2003, **20** (2) :127—129)
- [14] 祁月盈. 强激光场中模型原子的保结构计算[D]. 长春 : 吉林大学, 2004. (Qi Y Y. Preserving-structure computation for the model atom in the strong laser field. Changchun : Jilin University , 2004)
- [15] 吴海涛,龚尚庆,金石琦,等. 偶次和半整数次谐波的产生[J]. 光学学报, 2000, **20** (4) :440—445. (Wu H T , Gong S Q , Jin S Q , et al. Even and half-integer order harmonic generation. *Acta Optica Sinica*, 2000, **20** (4) :440—445)
- [16] Schumacher D W , Weihe F , Muller H G , et al. Phase dependence of intense field ionization : a study using two colors[J]. *Phys Rev Lett*, 1994, **73** :1344.
- [17] Kuchlev M Y , Ostrosky V N. Quantum theory of high harmonic generation as a three-step process[J]. *Phys Rev A*, 1999, **60** :3111.

Research and application of preserving-structure algorithm of high-order harmonic generation spectrum of one-dimensional He^+ by a two-color laser field

QI Yue-ying^{1,2}, LIU Shi-xing^{2,3}, LIU Xiao-yan^{2,4}, LI Ping-xue^{2,5}, DING Pei-zhu²

(1. School of Electrical Engineering, Jiaxing University, Jiaxing 314001, China ;

2. Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun 130012, China ;

3. Physics Department, Liaoning University, Shenyang 110036, China ;

4. Department of Mathematics, Northeast Normal University, Changchun 130024, China ;

5. Physics Department, Peking Industrial University, Beijing 100022, China)

Abstract : The high-order harmonic generation spectrums of He^+ irradiated by the two-color coherent laser field are researched by numerically solving the 1-D time-dependent Schrödinger equation using symplectic algorithm. The computational results show that great changes have already taken place at the emission of the high-order harmonics and the efficiency of the harmonic generation increases greatly and it averagely increases 10^3 times in the plateau, despite the fact that the intensity of the higher frequency laser is only 10% of the initial field in the two-color coherent field. The efficiency of the high-order harmonics is enhanced by nearly four orders of magnitude relative to the monomer field; moreover, the corresponding order of the higher frequency field is enhanced by about five orders, even ten orders though the harmonic plateau isn't extended to a higher frequency. The reason is that the population of the ground state descends and the population of the first-excited state increases in the two-color coherent laser relative that in the monochromic laser and the transition channel of the electron to the even-parity continuum becomes easy and smoothes. In particular, the high-frequency laser quickens the process that the electron ionizes and rebounds to the ground state.

Key words : Two-color laser field ; High-order harmonic ; Symplectic algorithm

