

强激光场中原子的束缚态和连续态 对高次谐波的影响*

周效信^{1,2)} 李白文²⁾

¹⁾ 西北师范大学物理系, 兰州 730070)

²⁾ 中国科学院武汉物理与数学研究所波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉 430071)

(2001 年 1 月 7 日收到, 2001 年 5 月 20 日收到修改稿)

利用基函数展开结合线性最小二乘法方法求解含时薛定谔方程, 研究了一维原子在强激光场中产生高次谐波过程中, 束缚态和连续态以及它们的干涉效应对高次谐波的影响. 结果表明, 低能的高次谐波是由束缚态-束缚态之间的相互作用产生的, 高能的高次谐波是由束缚态-连续态之间的相互作用产生的, 而截断频率后消失的高次谐波是由于束缚态-束缚态与束缚态-连续态之间存在干涉效应的结果.

关键词: 线性最小二乘法, 强激光场, 高次谐波的产生

PACC: 3280, 4250

1 引 言

近年来, 随着人们对激光输出系统的改进, 使用了啁啾脉冲放大技术, 使输出的激光光强在调 Q 和锁模技术的基础上提高了好几个数量级^[1,2]. 原子在这种强激光场中所发生的一些非线性多光子现象, 诸如高次谐波的产生 (HHG), 阈上电离 (ATI) 等引起了人们极大的兴趣, 特别是对高次谐波的研究相当活跃^[3]. 实验上已观察到在强激光场中的惰性气体原子可产生的高次谐波的阶数达到 100 次以上. 预期产生一个光子能量达到 1keV 以上的高次谐波很快就会实现^[4]. 这种光子的频率已经达到 X 射线区域. 因为这种高次谐波具有极好的相干性, 利用原子或某种物质在强激光场中产生的高次谐波很有希望成为一种新的 X 射线源, 因此对原子在强激光场中产生高次谐波的研究具有十分重要的意义.

当激光场的光强达到一定数值时, 处在基态原子中的电子会发生隧道电离, 我们称原子处在隧道电离区域. 在这个区域, 原子所产生的高次谐波的强度随谐波阶数 (或谐波能量) 的变化具有典型的特征: 前几个谐波的强度很快减小, 然后在较宽的能区内, 其强度变化较小而展示一个平台区域 (Plateau), 最后在某一个最高阶数处很快消失 (Cut-off), 这一

最高阶数满足经验公式 $N_{\max} = (I_{\text{at}} + 3.17 U_p) / \omega$ (其中 I_{at} 为原子的电离能, ω 为激光的频率, U_p 为电子在激光场中的有质动力能). Corkum^[5] 和 Krause 等人^[6] 分别利用简单的三步模型和量子力学计算证实了由实验给出的这个经验公式. 基于这个三步模型, Lewenstein 等人^[7] 和 Becker 等人^[8] 利用量子理论仅考虑原子的基态和连续态之间的相互作用来描述高次谐波的产生, 能够得到半解析的结果. 后来 Wang 等人^[9] 从这种理论形式出发, 成功地研究了在强激光场和强电场同时存在时原子产生的高次谐波的规律. 而要研究原子的束缚态 (包括基态和激发态) 对高次谐波的影响则需要直接求解含时薛定谔方程, 但直接求解实际的三维系统需要借助于大型计算机. 近年来发展起来的一维模型由于物理图像清晰、计算量小而获得了很大的成功, 因而可利用这些一维模型如一维原子^[10,11], 一维分子^[12,13] 以及一维的多重势阱^[14,15] 来模拟复杂系统在强激光场的行为. Faria 等人^[16] 考虑了一维原子的束缚态对高次谐波的贡献, 但他们使用的模型势仅有较少的束缚态, 也没有考虑束缚态-束缚态与束缚态-连续态之间的干涉效应对高次谐波的影响.

本文将利用我们最近建立的利用基函数展开结合线性最小二乘法方法直接求解含时薛定谔方程来研究具有很多个束缚态的一维原子在强激光场中其

* 国家自然科学基金 (批准号: 19734060, 19874051) 资助的课题.

束缚态和连续态对高次谐波的影响.与 close-coupling 方法相比,我们的方法^[17]的主要优点是不需要计算大量的偶极矩阵元,也不需要人为的在边界上加一个吸收子来吸收到达边界上的波包以避免其反射,而可以通过控制时间演化步长来达到此目的.

2 理论方法

在偶极近似和长度规范下,一维原子在激光场中的行为由含时的薛定谔方程描述(原子单位)

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - xE(t) \right] \psi(x, t), \quad (1)$$

其中 $V(x)$ 采用一维软库仑势的形式^[18]

$$V(x) = -\frac{1}{\sqrt{1+x^2}}, \quad (2)$$

$E(t)$ 为激光场的电场分量.

在文献 [17] 中,我们详细论述了方程 (1) 的求解方法,下面仅给出其要点.

第一步,选择合适的基函数.由于原子在强激光场中电离效应很强,因此所选的基函数必须能很好地描述电子的连续态效应.我们所选用的基函数是由原子最低的几个束缚态和 Fourier 函数的线性组合

$$\varphi_j(x) = \sum_{n=1}^{n_1} A_n \phi_n(x) + \sum_{n=1}^{n_2} \left[B_n \cos\left(\frac{n\pi x}{x_{\max}}\right) + C_n \sin\left(\frac{n\pi x}{x_{\max}}\right) \right] \quad (3)$$

其中 $\phi_n(x)$ 为原子在无场情况下的束缚态波函数,展开系数 A_n, B_n, C_n 可通过对角化的方法得到, x_{\max} 为空间积分的最大范围.实践证明,这种基函数既能很好地描述原子中电子的束缚态也能很好地描述其连续态.

第二步,对含时薛定谔方程离散化.以 (3) 式作为基函数将 (1) 式中的波函数展开为

$$\psi(x, t) = \sum_{j=1}^N c_j(t) \varphi_j(x). \quad (4)$$

再将 (4) 式代入 (1) 式,在坐标空间上选择 M 个网格点 ($M > N$),将薛定谔方程在这些网格点上离散化,然后利用最小二乘法得到 t 时刻的展开系数的导数 $dc_j(t)/dt$.这样就避免了计算偶极矩阵元.

第三步,对离散化后的方程组进行时间演化.由 t 时刻的波函数和 $dc_j(t)/dt$ 出发,再利用 Runge-Kutta 方法得到 $t + \Delta t$ 时刻体系的波函数.

一旦得到体系的含时波函数,很容易得到原子在强激光场中发射的高次谐波和原子的电离概率.高次谐波的强度正比于电子平均加速度的 Fourier 变换的模方

$$|P(\omega)|^2 = \left| \int e^{-i\omega t} a(t) dt \right|^2, \quad (5)$$

式中

$$\begin{aligned} a(t) &= \psi(x, t) | \hat{a} | \psi(x, t) \\ &= \psi(x, t) \left| -\frac{x}{(1+x^2)^{3/2}} \right. \\ &\quad \left. - E(t) \right| \psi(x, t) \end{aligned} \quad (6)$$

是电子的平均加速度,上式的第二步用到了艾伦菲斯特定理.而电子的电离概率为

$$P_I(t) = 1 - \sum_j |c_j(t)|^2, \quad (7)$$

式中的求和仅对束缚态进行.

为了研究原子的束缚态、连续态以及它们之间的干涉效应对高次谐波的影响,可以将体系的波函数 (4) 式改写为

$$\psi(x, t) = \psi_b(x, t) + \psi_c(x, t), \quad (8)$$

其中 b, c 分别表示束缚态部分和连续态部分.这样 (5) 式可写为

$$\begin{aligned} |P(\omega)|^2 &= |P_{bb}|^2 + |P_{bc}|^2 + |P_{cc}|^2 \\ &\quad + 2 [P_{bb}^R P_{cc}^R + P_{bb}^R P_{bc}^R + P_{bc}^R P_{cc}^R \\ &\quad + P_{bb}^i P_{cc}^i + P_{bb}^i P_{bc}^i + P_{bc}^i P_{cc}^i], \end{aligned} \quad (9)$$

式中前三项分别是束缚态-束缚态之间、束缚态-连续态之间、连续态-连续态之间的相互作用对高次谐波的贡献,而第四项则为相应的干涉效应对高次谐波的影响(上标 R, i 分别表示相应的实分量和虚分量).

3 计算结果与讨论

在计算中,我们使用的激光场的电场分量为

$$E(t) = \begin{cases} E_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{6T}\right) \sin \omega t & 0 \leq t \leq 3T, \\ E_0 \sin \omega t & 3T < t \leq 16T, \end{cases} \quad (10)$$

式中 E_0, ω, T 分别是电场的振幅,角频率和周期.为了研究原子在强激光场中处于隧道电离区域所产生的高次谐波,我们采用的参数需要满足 Keldysh^[19] 判据 $\gamma < 1$,才能使原子处于隧道电离区域,其中 $\gamma = \sqrt{2\omega^2 I_{at}}/I_1$ (I_{at} 为原子的电离势, I_1 为激光的光

强). 原子采用(2)式的势所具有的电离能为 $0.67a.u.$, 因此我们使用的电场参数为 $\omega = 0.07a.u.$ (相当于 10 个光子电离), $E_0 = 0.1a.u.$ ($3.5 \times 10^{14} W/cm^2$). 应当指出的是, 在满足 Keldysh 判据的情况下, 计算结果并不依赖于这些参数的选择. 在计算中所使用的基函数数目为 $N = 700$, 空间最大区域为 $x_{max} = 300a.u.$

图 1 给出了我们计算的电子电离概率 $P_1(t)$ 随时间的变化. 由图可见, 电离概率随时间增大并发生震荡, 而每一个激光周期内有两个极小值. 这两个极小值对应于激光场的电场达到最大和最小时产生的. 此时, 体系的波函数与无场的束缚态波函数的重叠积分最大. 从经典的图像来看, 发生隧道电离的电子, 可能以一定的概率被完全电离掉, 也可能以一定的概率(发生隧道电离后速度很小的电子)先随激光场加速, 然后随激光场的反向而回到原子核附近并与原子核碰撞后落回到基态, 从而将电子从激光场获得的能量(包括电子摆脱原子核的束缚而需要的电离能和获得的动能)以高次谐波的形式发射出来. 由于体系反射的对称性和时间反演的对称性, 只有那些是激光场频率奇数倍的谐波可以发射出来. 这就是经典的三步过程. 一般来说, 在隧道电离区域, 原子发射高次谐波最有效, 且高次谐波的最高阶数满足半经验公式 $N_{max} = (I_{at} + 3.17U_p) / \omega$, 而 $3.17U_p$ 就是电子在激光场中所能获得的最大动能.

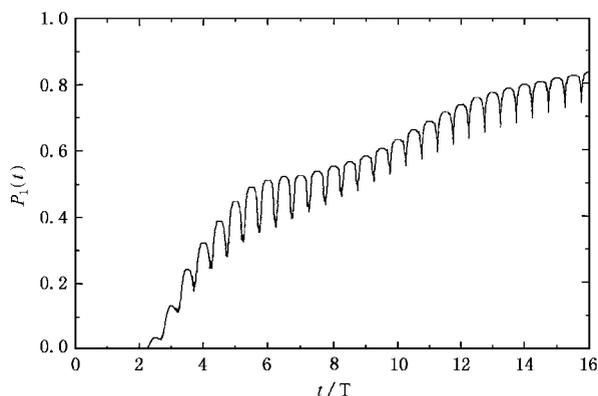


图 1 电离概率随时间(单位: 周期)的变化

图 2 的实线部分是考虑了(9)式中所有项的贡献后计算出的高次谐波. 我们的结果具有前面所述的高次谐波的典型特征, 第三阶(即第二个)高次谐波很快衰减, 然后在较宽的范围内其强度变化较小, 最后约在 $n = 35$ (n 为高次谐波的阶数) 处后很快衰减直至消失. 图中箭头所指的位置是利用半经验公

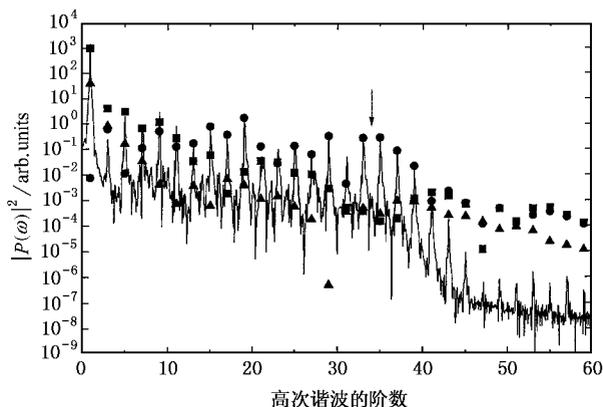


图 2 一维原子的高次谐波谱(实线为考虑了(9)式所有的贡献; 正方形为束缚态-束缚态的贡献, 圆形为束缚态-连续态的贡献; 三角形为连续态-连续态的贡献)

式估算的结果, 和我们的计算结果符合得很好. 为了考察(9)式中束缚态-束缚态之间, 束缚态-连续态之间以及连续态-连续态之间的相互作用分别对高次谐波的单独贡献, 我们还在图 2 中给出了相应的计算结果. 由图可以明显看出, 几乎在整个能区范围内连续态-连续态之间的相互作用的贡献都很小, 它只有对前三个谐波较之束缚态-连续态的贡献大一些. 而束缚态-束缚态的相互作用对 $n < 11$ 的贡献占主要方面, 然后逐渐减小, 这个结果与文献 [16] 的结果是一致的. 另一方面, 束缚态-连续态之间的相互作用对高次谐波的贡献则刚好相反, 对前四个谐波的影响几乎可以忽略, 然后从 $n = 11$ 一直到截断位置附近, 几乎完全是它的贡献, 特别是在接近截断位置附近更是如此. 按经典观点对产生高次谐波的描述, 在截断位置附近产生的高次谐波就是那些在激光场中获得最大动能的电子回到基态发射的, 即电子由连续态回到束缚态. 由此可见, 我们的计算能很好地说明, 经典描述的确给出了原子在强激光场中产生高次谐波的直观物理图像. 图 3 给出了由(9)式中前三项之和计算的高次谐波. 比较图 3 和图 2 的实线部分, 可以看出在图 3 中除了第二个谐波衰减较慢外, 还在截断位置后出现了又一个强度较弱的平台区域, 而在图 2 中则没有这个平台. 我们还对(9)式的最后一项即干涉项进行了计算, 对在截断位置之前的高次谐波而言, 干涉项有时会加强(如第 31 阶), 有时会减弱(如第 3 阶)前三项产生的结果; 而在截断位置之后这些干涉项的作用总是抵消前三项产生的高次谐波. 而且由于在 $n > 41$ 时, 束缚态-束缚态, 束缚态-连续态对高次谐波贡献的数量级几

乎相同,此时干涉效应最强,从而导致高次谐波的消失.显然,这与半经典的解释不同.

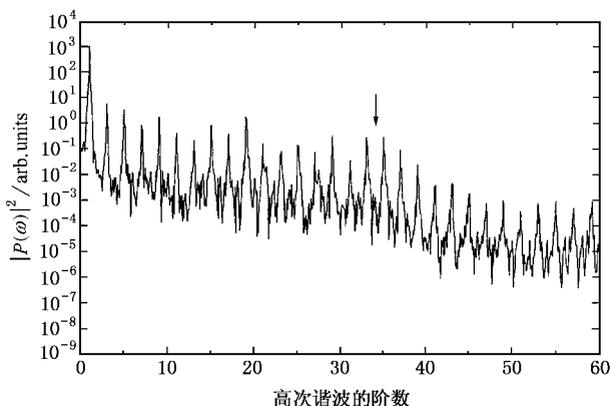


图3 没有考虑干涉项作用的高次谐波谱

近年来,人们常用另一种简化模型研究原子在强激光场中产生的高次谐波^[7,8].该模型仅考虑原子的基态和连续态对高次谐波的贡献,可以得到半解析的结果.为了比较仅考虑基态和连续态与考虑所有的束缚态和连续态对高次谐波贡献的差别,我们在图4中给出了相应的结果.由图可以看出,除了较低的几个谐波的强度稍有差别以及在截断位置后前者给出谐波的强度衰减得较慢外,两者的结果基本一致.两者差别的主要原因是由于该模型的干涉效应较弱产生的.

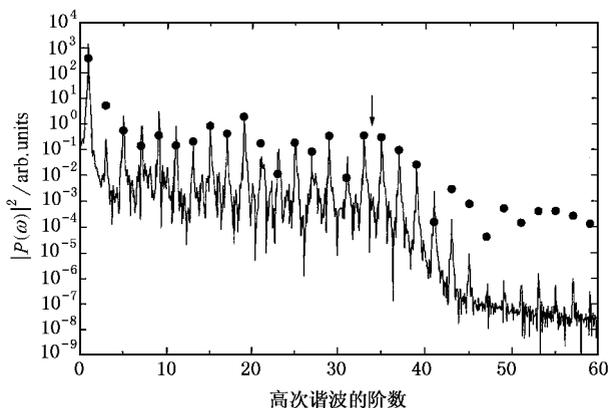


图4 一维原子的高次谐波谱(实线为考虑了(9)式所有的贡献;圆形为基态-连续态的贡献)

此外我们还比较了文献[16]与本文的结果.两者相同的是低能的高次谐波主要来自于束缚态-束缚态的贡献,而高能的高次谐波则主要是束缚态-连续态的贡献.不同的是在文献[16]中,束缚态-束缚

态的贡献随着高次谐波阶数的增加其强度衰减得较快,而本文的结果则衰减得较慢,这主要是文献[16]考虑原子仅有两个或几个束缚态,而由不同的束缚态-束缚态之间的跃迁发射的高次谐波同样也要产生干涉效应,而这些干涉效应的贡献主要在高能区域,由于束缚态较少,则束缚态之间的干涉效应就很弱,使得这一部分贡献衰减得很快.而我们采用的是长程势,可以有多个束缚态,在这种情况下,干涉效应就远远大于文献[16]的情况,因此导致高次谐波衰减得较慢.

4 结 论

本文使用我们最近建立的由基函数展开结合最小二乘法求解了一维原子在强激光场中的含时薛定谔方程,得到了强激光场中的原子在隧道电离区域所产生的高次谐波.通过分析原子的束缚态-束缚态、束缚态-连续态、连续态-连续态之间的相互作用以及它们之间的干涉效应对高次谐波的影响,得到如下结论:对低能的高次谐波,主要贡献来自于束缚态-束缚态之间的相互作用,这些贡献随着阶数的增加而衰减;对平台区域,高次谐波主要来自于束缚态-连续态的贡献,而连续态-连续态之间的相互作用对高次谐波的影响始终都比较小,比主要贡献者至少小一个数量级;在截断位置之后,虽然这三者的贡献特别是前两者的贡献衰减得较慢,但由于干涉效应在该区域总是抵消前两者的结果,并且产生干涉效应的这两项的强度相当,使得干涉效应最强,导致高次谐波在该处消失.在平台区域虽然也有明显的干涉效应,但这些干涉效应对有些高次谐波是相消的(如 $n = 3$ 的谐波),而有些是相长的(如 $n = 31$ 的谐波),且产生干涉效应的两项其强度差别较大,使干涉效应对总结果的影响较小.此外,我们的计算,还表明仅考虑原子的基态和连续态这种模型所预言的结果是可靠的.

总之,与比较直观的经典三步模型相比,我们的理论计算,可以从另一个方面来理解原子在强激光场中产生高次谐波的动力学规律.三步模型认为截断位置处的高次谐波阶数与电子在激光场中获得最大有质动力势有关,而从量子力学的计算表明是束缚态-束缚态与束缚态-连续态之间的干涉效应导致截断位置后的高次谐波消失.因此,对这一过程的物理实质有了更为深刻的认识.

- [1] M. Protopapas , C. H. Keitel , P. L. Knight , *Rep. Prog. Phys.* , **60**(1997) , 389.
- [2] Zhang Jie , *Physics* , **26**(1997) , 643 [in Chinese] 张杰 *物理* **26** (1997) , 643.
- [3] P. Salieres , A. L 'Huillier , M. Lewenstein , *Adv. At. Mol. Opt. Phys.* , **41**(1999) , 41.
- [4] M. W. Walser , C. H. Keitel , A. Scrinzi , T. Brabec , *Phys. Rev. Lett.* , **85**(2000) , 5082.
- [5] P. B. Corkum , *Phys. Rev. Lett.* , **71**(1993) , 1994.
- [6] J. L. Krause , K. J. Schafer , K. C. Kulander , *Phys. Rev. Lett.* , **68**(1992) , 3535.
- [7] M. Lewenstein , Ph. Balcou , M. Yu. Ivanov , A. L 'Huillier , P. B. Corkum , *Phys Rev.* , **A49**(1994) , 2117.
- [8] W. Becker , S. Long , J. K. McIver , *Phys. Rev.* , **A50**(1994) , 1540.
- [9] B. Wang , X. Li , P. Fu , *J. Phys.* , **B31**(1998) , 1961.
- [10] Q. Su , B. P. Irving , C. W. Johnson , J. H. Eberly , *J. Phys.* , **B29**(1996) , 5755.
- [11] Wei-xing Qu , Su-xing Hu and Zhi-zhan Xu , *Acta Physica Sinica* **48** (1999) , 825 [in Chinese] 屈卫星、胡素兴、徐至展 *物理学报* , **48**(1999) , 825] .
- [12] S. Chelkowski , C. Foisy , A. D. Bandrauk , *Phys. Rev.* , **A57** (1998) , 1176.
- [13] S. X. Hu , W. X. Qu , Z. Z. Xu , *J. Phys.* , **B31**(1998) , 1523.
- [14] R. Numico , D. Giulietti , A. Giulietti , L. A. Gizzi , L. Roso , *J. Phys.* , **B33**(2000) , 2605.
- [15] P. Martin , *J. Phys.* , **B29**(1996) , L635.
- [16] C. F. de. M. Faria , M. Dorr , W. Sander , *Phys. Rev.* , **A58** (1998) , 2990.
- [17] Xiao-xin Zhou , C. D. Lin , *Phys. Rev.* , **A61**(2000) , 053411.
- [18] J. Javanainen , J. H. Eberly , Q. Su , *Phys. Rev.* , **A38**(1988) , 3430.
- [19] L. V. Keldysh , *Sov. Phys. JETP* , **20**(1965) , 1307.

CONTRIBUTION OF THE BOUND STATES AND CONTINUUM STATES OF AN ATOM IN INTENSE LASER FIELDS TO HIGH HARMONIC GENERATION*

ZHOU XIAO-XIN^{1,2)} LI BAI-WEN²⁾

¹(*Department of Physics , Northwest Normal University , Lanzhou 730070 , China*)

²(*State Key Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics , Wuhan Institute of Physics and Mathematics , Chinese Academy of Sciences , Wuhan 430071 , China*)

(Received 7 January 2001 ; revised manuscript received 20 May 2001)

ABSTRACT

Solving the time-dependent Schrodinger equation for a one-dimensional atom in an intense laser field based on the basis function expansion and a linear-least-squares fitting method , we examine the influence of the bound states , continuum states and the interference between them of the model atom on the high harmonic generation. It is found that the main contributions to the low-energy harmonic generations come from the bound-bound interaction , while the high-energy harmonic generations are from the bound-continuum interaction. Beyond the cut-off , the interference of the bound-bound and bound-continuum interactions leads to the disappearance of the harmonic generation.

Keywords : a linear-least-squares fitting method , intense laser field , high harmonic generation

PACC : 3280 , 4250