

# 双色激光场中高次谐波转化效率的提高\*

张春丽<sup>1)</sup> 祁月盈<sup>1,2)</sup> 刘学深<sup>1)†</sup> 丁培柱<sup>1)</sup>

1) 吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012)

2) 嘉兴学院机电工程学院, 嘉兴 314001)

(2006 年 5 月 29 日收到, 2006 年 6 月 30 日收到修改稿)

采用渐近边界条件和辛算法数值求解双色激光场与模型 Pöschl-Teller 势相互作用的含时 Schrödinger 方程, 计算了电离概率、平均位移、高次谐波以及跃迁概率. 数值结果显示添加 6 倍频光的双色激光场能使高次谐波转化效率明显提高. 分析了双色激光场极大地提高高次谐波转化效率的机理, 并且通过对产生特定级次谐波的跃迁概率的计算, 给出高次谐波转化效率提高的具体数值.

关键词: 渐近边界条件, 辛算法, 双色激光场, 高次谐波

PACC: 3280, 4250

## 1. 引 言

近几十年来, 激光技术尤其短脉冲强激光技术获得飞速发展, 目前实验室已可获得最大强度高达  $10^{20}$  W/cm<sup>2</sup> 的激光脉冲, 这使得激光技术以及基于激光技术的研究取得了巨大进展. 激光与原子、分子、团簇相互作用的研究已成为物理、化学与材料科学领域极为活跃的前沿基础研究课题<sup>[1-4]</sup>.

激光与物质相互作用所放出的高次谐波不仅是产生真空远紫外线和软 X 射线的可能途径, 而且被认为是从飞秒(波长  $10^{-15}$  s)光脉冲向阿秒(波长  $10^{-18}$  s)光脉冲转换的最有前途的候选方案, 高次谐波已成为当前强激光场物理中最具活力的研究方向.

近年来, 对高次谐波的研究主要集中在谐波的平台和截止位置<sup>[5]</sup>. 例如, 利用高次谐波产生的非微扰电动力学理论得到了高次谐波的产生和阈上电离的直接关系<sup>[6]</sup>; 长程势与短程势原子产生高次谐波和电离概率的关系<sup>[7]</sup>; 采用附加共振高频场能够提高高次谐波的转化效率<sup>[8]</sup>; 双色场中 H 原子的高次谐波和电离概率对相对相位的依赖关系<sup>[9]</sup>; 短脉冲在 2-能级原子中传播的双色干涉效应, 以及传播特性对相对相位的依赖关系<sup>[10]</sup>; 基频场与特殊的谐波

脉冲的混合能使 He<sup>+</sup> 的高次谐波的转化效率以及电离概率提高几个数量级<sup>[11]</sup>, 等等.

本文中我们应用渐近边界条件<sup>[12]</sup>将无穷空间初值问题截断成有界空间初边值问题, 而后辛离散成有限维正则方程并采用辛算法<sup>[13]</sup>数值求解, 求得双色场中具有三个束缚态的模型 Pöschl-Teller 势的数值含时波函数, 应用于计算了高次谐波, 探索和研究了双色场极大地提高高次谐波转换效率的机理, 并对高次谐波转化效率的提高给出定量的分析.

## 2. 理论方法

强激光与 1 维模型原子相互作用由含时 Schrödinger 方程的无穷空间初值问题(原子单位下)描述如下:

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

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

$$\Psi(x, 0) = \Phi(x) \quad (-\infty < x < \infty) \quad (3)$$

其中  $\epsilon(t)x$  是激光场与原子的相互作用势,  $\epsilon(t)$  是

\* 国家自然科学基金(批准号: 30574057, 10571074)和高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20050183010)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: liuxs@jlu.edu.cn

激光场电场强度;  $V_0(x)$  是原子势;  $\Phi(x)$  是初始状态. 为了数值计算需要在空间充分远处做截断, 因为是强场, 在充分远处的边界条件不能简单地取为零. 人们提出了多种方法构造面具函数 (mask function) 用作空间充分远处的边界条件 (譬如吸收边界条件, 反射边界条件)<sup>[14]</sup>.

在空间充分远  $R$  处我们利用渐近边界条件<sup>[12]</sup>

$$\tilde{\Psi}(\pm R, t) = \Phi(\pm R - \alpha(t)) \times \exp\left(-iA(t)\tilde{\Phi}(\pm R) - i\frac{1}{2}q(t)\right), \quad (4)$$

其中  $A(t) = -\int_0^t \epsilon(t) dt$ ,  $\alpha(t) = \int_0^t A(t) dt$ ,  $q(t) = \int_0^t A^2(t) dt$ . 将强激光场中 1 维模型原子的无穷空间初值问题转化为下述有界空间的初边值问题

$$\begin{cases} i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) \\ = \left[-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_0(x) + \epsilon(t)x\right]\Psi(x, t) \\ \quad (-R \leq x \leq R, 0 \leq t \leq T), \\ \Psi(\pm R, t) = \tilde{\Psi}(\pm R, t) \quad (0 \leq t \leq T), \\ \Psi(x, 0) = \Phi(x) \quad -R \leq x \leq R. \end{cases} \quad (5)$$

问题 (5) 可以离散哈密顿量显含时间的有限维可分哈密顿正则方程的初值问题, 可用哈密顿量显含时间可分哈密顿系统辛格式求解<sup>[12]</sup>. 对于渐近边界和辛算法的具体细节可以参阅文献 [12, 13].

### 3. 数值结果与讨论

我们考虑具有三个束缚态的短程模型 Pöschl-Teller 势

$$V_0(x) = -\frac{0.7}{\cosh^2(0.4x)},$$

其中束缚态能量分别为:  $E_0 = -0.5$  au,  $E_1 = -0.18$  au,  $E_2 = -0.02$  au. 双色激光场的形式选为

$$\epsilon(t) = \epsilon_0 f(t) (\sin(\omega_0 t) + r \sin(n\omega_0 t)),$$

其中  $\epsilon_0 = 0.03$  au 为激光场电场强度的峰值,  $\omega_0 = 0.055$  au 为基频光频率,  $n$  为倍频光倍数,  $f(t) = \sin^2(\omega_0 t/2N)$  为脉冲包络,  $N = 5$  为光学周期数,  $T_0 = 2\pi/\omega_0$  为光学周期, 空间边界取为  $R = 200$  au.

#### 3.1. 单色场和双色场中数值结果的比较

我们计算了单色场 ( $r = 0$ ) 和添加 6 倍频光的双色场 ( $r = 0.2, n = 6$ ) 中的电离概率、平均位移、跃迁

概率及高次谐波谱.

图 1 是单色场和双色场中的电离概率、平均位移和高次谐波. 其中图 1(a) 是单色场中的电离概率, 图 1(b) 是双色场中的电离概率; 图 1(c) 是单色场 (实线) 和双色场 (点线) 中的平均位移; 图 1(d) 是单色场 (实线) 和双色场 (点线) 中的高次谐波谱. 从图 1(a) 中我们可以看到单色场下的电离概率最大值小于 0.00008, 而图 1(b) 中添加 6 倍频光的双色场中的电离概率最大值接近 0.07, 因此双色场使电离产额得到了极大的增强, 可以保证电子在连续态具有一定的布居; 图 1(c) 显示 6 倍频光的加入使得电子平均位移的最大值和振荡速率均大于单色场, 即双色场中电子有更多的机会返回束缚态, 放出更多的高能光子; 图 1(d) 显示双色场中的高次谐波的转化效率比单色场提高将近 4 个数量级. 而且图中的截止频率与预言公式  $N = \left(I_p + 3.17 \times \frac{\epsilon_0^2}{4\omega_0^2}\right)/\omega_0$  算得的基本相符.

图 2 分别是单色场 (a) 和添加 6 倍频光的双色场 (b) 中从连续态返回束缚态并能产生 8-次谐波的跃迁概率随时间的演化. 从图中可以看到, 在添加 6 倍频光的双色场中的跃迁概率比在单色场中的跃迁概率提高了将近 4 个数量级. 也就是说 6 倍频光的加入增加了电子在连续态和束缚态间的跃迁, 实现了快速地返回束缚态并放出高能光子的目的. 并且跃迁概率提高的量级与图 1(d) 中高次谐波平台提高的量级是一致的.

#### 3.2. 双色场中不同倍频光的影响

为了研究添加不同倍频光对高次谐波转化效率的影响, 我们分别计算了添加 2 倍频光 ( $r = 0.2, n = 2$ ) 和 10 倍频光 ( $r = 0.2, n = 10$ ) 的双色场中的电离概率、平均位移、第一激发态的布居概率、连续态和束缚态间的跃迁概率及高次谐波, 数值结果如图 3—7 所示.

如图 3(a) 所示, 双色场中的电离概率均高于单色场中的情形, 但随着倍频光倍数的增加电子的电离概率不是呈线性增长的, 而是以添加 6 倍频光后的电离曲线位置最高. 图 3(b) 是图 3(a) 的纵坐标在 0—0.0012 上的放大, 其中添加 10 倍频光的电离概率大于添加 2 倍频光和单色场的电离概率. 添加 6 倍频光的双色场中电子的电离概率远大于单色场, 添加 2 倍频光和 10 倍频光的电离概率, 这充分显示

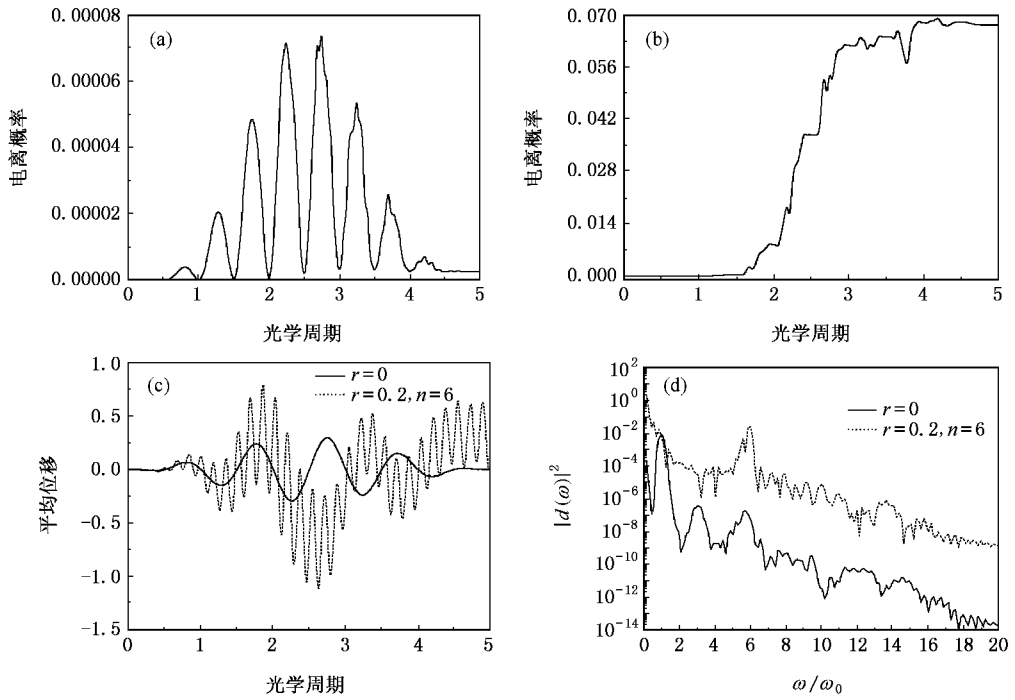


图 1 单色场和双色场中的电离概率、平均位移和高次谐波 (a)单色场中的电离概率 (b)双色场中的电离概率; (c)单色场(实线)和双色场(点线)中的平均位移 (d)单色场(实线)和双色场(点线)中的谐波谱

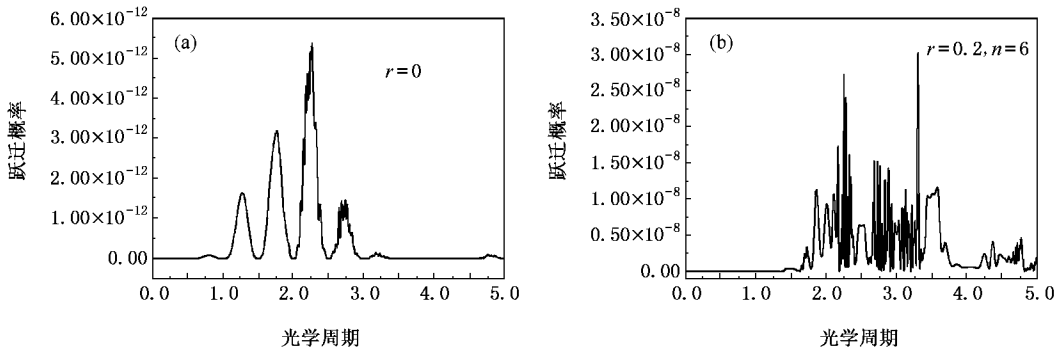


图 2 单色场(a)和添加6倍频光的双色场(b)中产生8-次谐波的跃迁概率

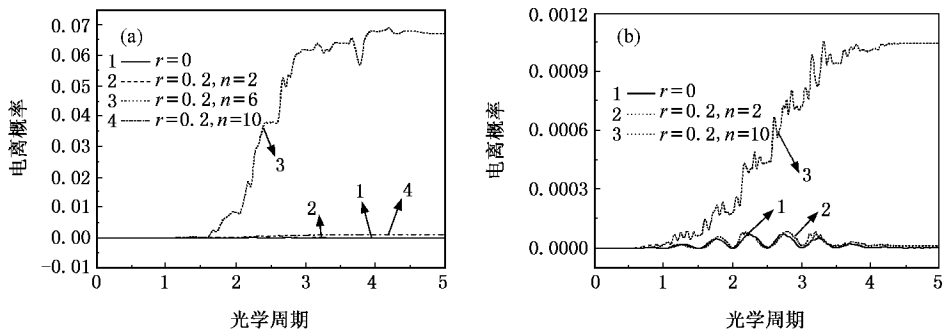


图 3 (a)单色场和不同倍频光的双色场中的电离概率 (b)同图(a),但是纵坐标在0附近局部放大单色场和不同倍频光的双色场中的电离概率

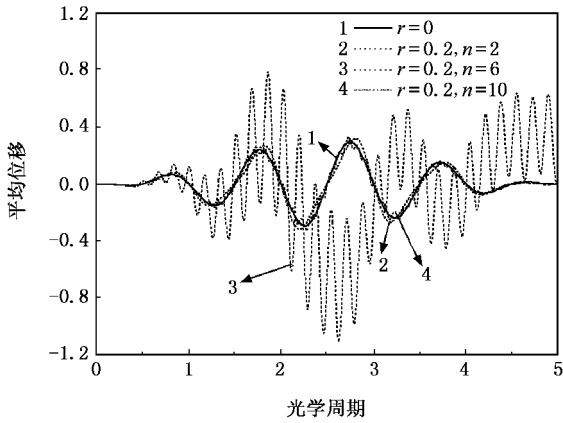


图 4 单色场和不同倍频光的双色场中电子的平均位移

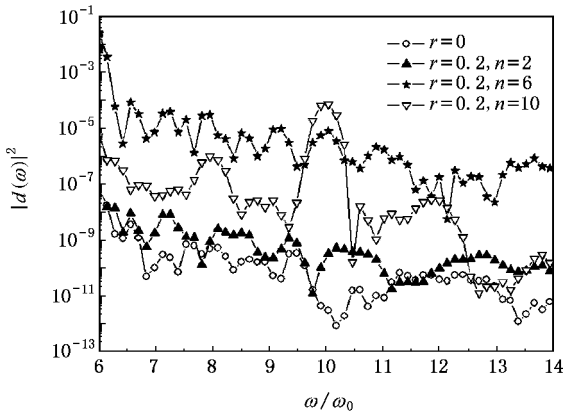


图 5 单色场和不同倍频光的双色场下的高次谐波谱

了 6 倍频光的加入对电子电离概率的贡献. 而且从图 4 中我们也可以看到添加 2 倍频光(虚线)和 10 倍频光(点虚线)后的双色场中电子的平均位移随时间的演化曲线几乎与单色场(实线)的结果重合;而添加 6 倍频光后的双色场中电子的平均位移的最大值和振荡速率明显大于前三种情况,这就增加了电子返回与核复合的机会,为放出更多的高能光子进

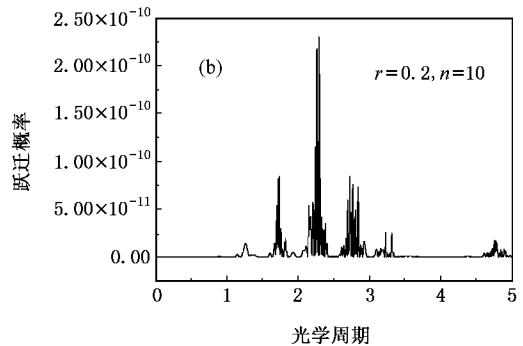
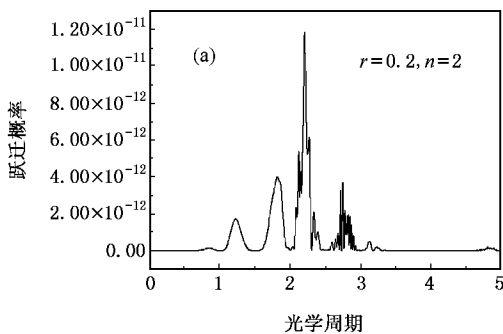


图 6 添加 2 倍和 10 倍频光的双色场下产生 8-次谐波的跃迁概率

而提高高次谐波的转化效率提供了条件. 图 5 中给出了四种情况下的谐波谱,我们可以看到,双色场中的谐波平台均高于单色场中的结果,而且其中添加 6 倍频光后的双色场使高次谐波平台提高的最大.

为了定量的分析高次谐波转化效率的提高,在图 6 中分别给出了添加 2 倍,10 倍频光的双色场中产生 8-次谐波的跃迁概率. 我们计算了在整个脉冲作用下单色场和双色场中从连续态返回束缚态并能产生 8-次谐波的跃迁概率,结果分别为:单色场为  $(2.51 \times 10^{-10})$ ; 2 倍频的双色场为  $(3.19 \times 10^{-10})$ ; 6 倍频的双色场为  $(1.59 \times 10^{-6})$ ; 10 倍频的双色场为  $(3.06 \times 10^{-9})$ ,即添加 6 倍频光的双色场与单色场、添加 2 倍,10 倍频光的双色场相比使跃迁概率分别提高了大约 4, 4, 3 个数量级. 这与图 5 中的 8-次谐波平台的位置相吻合. 6 倍频光( $r=0.2, n=6$ )的双色场分别比单色场( $r=0$ ), 2 倍频光( $r=0.2, n=2$ )的双色场和 10 倍频光( $r=0.2, n=6$ )的双色场高大约 4, 4 和 3 个数量级. 也就是说我们可以通过计算产生某一级次谐波的跃迁概率来判断这一级次谐波转化效率提高的具体数值.

下面我们分析添加 6 倍频光的双色场使高次谐波转化效率明显提高的原因.

首先从共振的角度出发:我们所选取的模型势的基态与第一激发态间的能级差为 0.32 au,而添加的 6 倍频光的单光子能量为 0.33 au,接近基态与第一激发态间的能级差,使电子容易发生单光子跃迁到第一激发态从而增加第一激发态的布居概率. 图 7 给出了单色场下和添加 2, 6, 10 倍频光的双色场中第一激发态的布居概率,结果证实了我们的分析: 2 倍频光和 10 倍频光的加入使第一激发态的布居概率和单色场的情形差别很小,而 6 倍频光的加入使得第一激发态的布居明显增加. 这样电子可以从基态和第一激发态同时跃迁到连续态,使连续态与

基态和第一激发态间的跃迁通道都被打开,跃迁更加畅通,从而加快了电子从连续态到束缚态间的跃迁速率,如图2和图6所示:6倍频光的加入使电子从连续态到束缚态间的跃迁较单色场和添加2,10倍频光后提高3到4个数量级,这与图5中谐波谱平台提高的位置是吻合的.每次跃迁放出一定概率的高能光子,也就是说跃迁提高的倍数与谐波转化效率提高的倍数是一致的,而且我们所选的基频场强能保证束缚态和连续态都有一定的布居.

其次从高次谐波产生的三步模型理论出发:第一步电子在激光场的作用下离开核到达连续态;第二步电子在连续态中运动并继续从激光场中获得能量;第三步电子在激光场反向作用下一部分电子继续运动脱离核的作用,而另一部分则返回束缚态并放出高能光子即发射出高次谐波.6倍频光的加入加快了三步模型理论中的第一步,使一定概率的电子更快的离开核到连续态,一定概率的电子仍然处在束缚态;同时增加了电离产量,使电子在连续区的

布居概率增大,为第三步中有更大概率电子返回束缚态提供了可能.而且从平均位移的计算中我们可以看到6倍频光加入后电子平均位移振荡的振幅增加,振荡频率加快,电子每振荡一次相当于完成一个三步循环,放出一定概率的高能光子.电子平均位移振荡地越快在相同的时间内能完成更多的三步循环,即能放出更多的高能光子,实现了高次谐波转化效率的提高.

结果如图5所示6倍频光的加入使高次谐波的平台明显高于单色场和添加2倍频光,10倍频光的双色场的结果,达到了提高高次谐波平台的目的.这验证了Ishikawa<sup>[11]</sup>对 $\text{He}^+$ 离子的结论:通过添加H27和H13促进了到2s,2p及其附近的亚稳态上的跃迁,在这样的能级上通过基频激光脉冲电子更容易到达连续态使电离概率增加,进而提高高次谐波的效率.而且说明这种方法不仅对 $\text{He}^+$ 离子有效,更具有一般性.

同时我们注意到:图5中添加10倍频光的双色

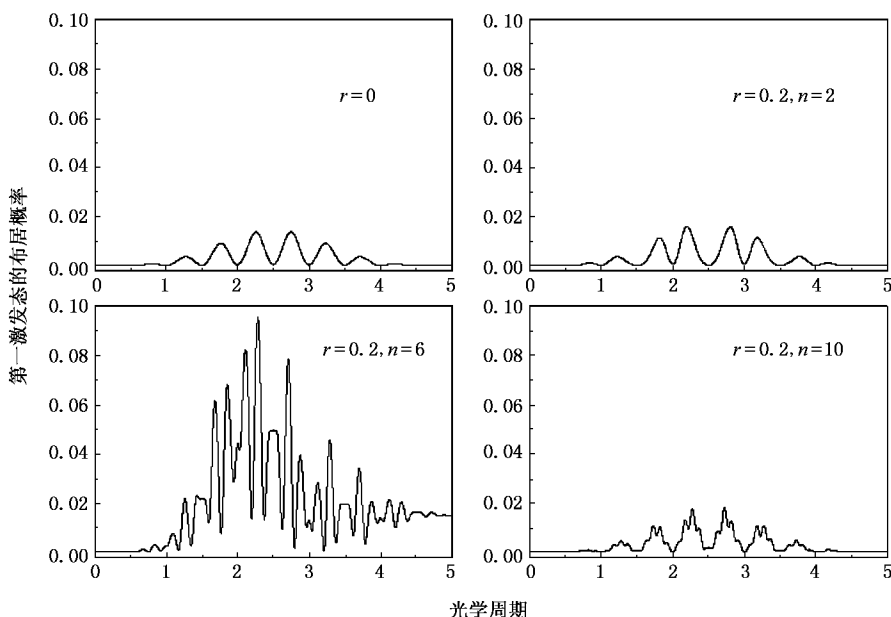


图7 单色场下和添加2倍,6倍和10倍频光的双色场下的第一激发态的布居概率

场中的高次谐波平台高于单色场和添加2倍频光的双色场的情形.这是由于所添加的10倍频光的单光子能量为0.55 au,大于基态的束缚能0.5 au,使得电子经过单光子电离直接跃迁到电离连续态,但是由于倍频光的场强峰值为0.006 au,虽然电离概率大于单色场的情形,但最大值也不超过0.0012(如图1(b),远小于6倍频的(0.07)).在整个脉冲下的跃迁

概率为 $3.06 \times 10^{-9}$ ,虽然大于单色场的跃迁概率 $2.51 \times 10^{-10}$ ,但仍低于添加6倍频光的跃迁概率 $1.59 \times 10^{-6}$ .这就导致了添加10倍频光的双色场中的高次谐波略高于单色场和添加2倍频光的双色场的情形,但还是低于添加6倍频光的结果.这样我们可以通过对跃迁概率的计算来判断谐波谱平台的相对位置.

## 4. 结 论

采用渐近边界条件和辛算法数值求解双色激光场与模型 Pöschl-Teller 势相互作用的含时 Schrödinger 方程, 计算了电离概率、平均位移、高次谐波以及跃迁概率. 数值结果显示, 添加 6 倍频光的双色激光场能使高次谐波转化效率明显提高.

我们分析了双色激光场极大地提高高次谐波转化效率的机理, 即添加的 6 倍频光的单光子能量接近基态与第一激发态间的能级差, 能够形成基态与

第一激发态间的共振, 使电子发生单光子跃迁到第一激发态从而增加第一激发态的布居概率, 使电子向偶宇称连续态跃迁通道更加畅通, 进而极大地提高高次谐波的转化效率.

我们还通过对电子平均位移的计算定性地分析高次谐波转化效率提高的程度, 即当电子平均位移振荡的振幅越大, 振荡频率越快时高次谐波转化效率越高. 通过对产生特定级次谐波的跃迁概率的计算, 可以定量地判断谐波转化效率提高的具体量级, 为高次谐波转化效率提高的定量分析提供了一种方法.

- [ 1 ] Krause J L, Schafer K J, Kulander K C 1992 *Phys. Rev. A* **45** 4998
- [ 2 ] Hay N, Velotta R, Lein M, de Nalda R, Heesel E, Castillejo M, Marangos J P 2002 *Phys. Rev. A* **65** 053805
- [ 3 ] Zheng L, Wang C, Li S H, Liu B C, Ni G Q, Li R X, Xu Z 2006 *Chin. Phys.* **15** 697
- [ 4 ] Zeng Z N, Li R X, Xie X H, Xu Z Z 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2317 ( in Chinese ) [ 曾志男、李儒新、谢新华、徐至展 2004 物理学报 **53** 2317 ]
- [ 5 ] Cheng T W, Li X F, Ao S Y, Fu P M 2003 *Chin. Phys. Lett.* **20** 1511
- [ 6 ] Wang B B, Li X F, Gao L H, Fu P M, Guo D S, Freeman R R 2001 *Chin. Phys. Lett.* **18** 1199
- [ 7 ] Li P C, Zhou X X, Dong C Z, Zhao S F 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 750 ( in Chinese ) [ 李鹏程、周效信、董晨钟、赵松峰 2004 物理学报 **53** 750 ]
- [ 8 ] Zeng Z N, Li R X, Cheng Y, Qu W X, Xu Z Z 2001 *Acta. Opt. Sin.* **21** 1153 ( in Chinese ) [ 曾志男、李儒新、程 亚、屈卫星、徐至展 2001 光学学报 **21** 1153 ]
- [ 9 ] Cheng T W, Li X F, Fu P M, Chen S G 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 1088
- [ 10 ] Song X H, Gong S Q, Jin S Q, Xu Z Z 2002 *Phys. Lett. A* **319** 150
- [ 11 ] Ishilawa K 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 043002
- [ 12 ] Qi Y Y, Liu X S, Ding P Z 2006 *J. Math. Chem.* **39** 133
- [ 13 ] Feng K 1986 *J. Comput. Math.* **4** 279
- [ 14 ] Hu S X, Xu Z Z 1997 *Phys. Rev. A* **56** 3916

# The enhancement of efficiency of high-order harmonic generation in two-color laser field<sup>\*</sup>

Zhang Chun-Li<sup>1)</sup> Qi Yue-Ying<sup>1,2)</sup> Liu Xue-Shen<sup>1)†</sup> Ding Pei-Zhu<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> *Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun 130012, China*

<sup>2)</sup> *School of Electrical Engineering, Jiaying University, Jiaying 314001, China*

( Received 29 May 2006 ; revised manuscript received 30 June 2006 )

## Abstract

We solve the time-dependent Schrödinger equation in two-color laser fields by using asymptotic boundary condition and symplectic algorithm. The Pöschl-Teller potential model with three bound states was considered in the numerical calculation. The population of ionization, average distance, HHG and the population of transition were calculated. We show that the efficiency of high-order harmonic generation (HHG) in two-color laser field can be enhanced, and analyze the mechanism of the enhancement of HHG. We demonstrate qualitatively the enhancement of conversion efficiency of HHG by the transition probability.

**Keywords** : asymptotic boundary condition, symplectic algorithm, two-color laser field, high-order harmonic generation

**PACC** : 3280, 4250

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 10574057, 10571074 ) and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education ( Grant No. 20050183010 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : liuxs@jlu.edu.cn