

强激光场中模型氢原子的势函数 对产生高次谐波强度的影响^{*}

李会山¹⁾²⁾ 李鹏程¹⁾ 周效信^{1)†}

1) 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

2) 青海大学基础部, 西宁 810016)

(2009 年 1 月 18 日收到, 2009 年 2 月 15 日收到修改稿)

在保证一维模型氢原子基态能量不变的前提下, 通过构造一个可调参数的势函数, 研究了在单个周期和多个周期激光作用下, 取不同参数势函数一维模型氢原子产生的高次谐波谱规律. 结果表明, 在过垒电离区域, 一维模型氢原子的高次谐波强度与势函数势阱的深度有关, 与势函数是否存在库仑奇点没有直接关系.

关键词: 强激光场, 一维模型氢原子, 势函数, 高次谐波

PACC: 3280, 4250

1. 引 言

近年来随着超强超短脉冲激光技术的不断发展, 强激光场中原子产生的高次谐波(HHG)以其诱人的应用前景引起了学者们的广泛关注, 在这方面已经有了大量的研究^[1-8]. 目前人们利用高次谐波得到了脉冲持续时间很短的极紫外高频相干辐射(XUV), X 射线源和阿秒相干脉冲^[9-11]. 由于获得 XUV 和 X 射线及阿秒相干脉冲主要是利用高次谐波平台的末端区域, 因此高次谐波在平台区域特性的理论研究成为当前研究高次谐波的热点之一^[12, 13].

强激光场与原子相互作用的理论研究主要是通过数值方法求解强激光场中原子的含时薛定谔方程. 由于求解三维真实原子的含时薛定谔方程计算量巨大, 需要耗费大量的计算机机时, 为了减少计算量, 1989 年 Eberly 等人使用一维模型原子代替三维真实原子来模拟强激光场与原子的相互作用, 成功地解释了实验结果^[14]. 1999 年 Brewczyk 等人采用 Thomas-Fermi 模型计算了一维模型原子与一维模型分子的高次谐波特性^[15]. 由于使用一维模型势代替

三维真实库仑势一方面大大地减少了机时, 另一方面, 其产生的高次谐波除了绝对强度存在差异以外, 它们的平台趋势及截止位置与三维真实原子的结果符合得很好^[16, 17]. 对于高次谐波的研究来说, 人们更关注的是谐波的相对强度及其截止位置, 采用一维模型原子能够很好地描述高次谐波的性质^[17]. 最近 Gordon 等人详细研究了一维模型氢原子和三维真实氢原子在单个周期激光作用下产生高次谐波的特点^[18, 19]. 他们的研究表明, 由于采用了具有库仑奇点(singularity)的模型势函数, 使得一维模型氢原子的高次谐波谱平台提高, 与三维真实氢原子的谐波谱符合得较好. 由 Corkum 半经典三步模型^[20]可知, 原子产生高次谐波的截止位置阶数约在 $N_{\max} = (I_{\text{at}} + 3.17 U_p) / \omega$ 附近, 其中 I_{at} 为原子的电离能, ω 为激光场的频率, U_p 为电子在激光场中的有质动力能($U_p = \frac{E^2}{4\omega^2}$). 根据该模型, 强激光场中原子产生的高次谐波的强度受到诸多因素的影响, 原子在激光场中的电离概率以及电离出的电子在激光场作用下与原子核的复合概率是其中的两个重要因素, 而这两个因素同时又受到势函数的影响.

根据先前的研究^[21], 我们推测一维模型原子的

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10674112), 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心, 甘肃省教育厅基金(批准号:10601-23), 西北师范大学创新项目(批准号: NWN- KJCXGC-03-21)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: zhoux@nwnu.edu.cn

高次谐波强度与势函数是否存在库仑奇点没有直接的关系,而是受到势函数势阱深度的影响.为了证实这一判断,我们构造出了具有三个可调参数的势函数,在保证一维模型氢原子基态能量不变的前提下,通过改变参数来调节势函数势阱的深度和宽度.在计算中采用分裂算符方法^[22]求解一维模型氢原子和三维真实氢原子的含时薛定谔方程,得到了单个和多个周期激光作用下不同参数势函数的一维模型氢原子产生的高次谐波谱,并将它们与三维真实氢原子的计算结果进行比较,得出了一些不同于 Gordon 等人的结论.

2. 理论方法

2.1. 薛定谔方程的数值求解

在偶极近似和长度规范下,强激光场中一维模型氢原子满足的含时薛定谔方程为(采用原子单位)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H}(x, t) \psi(x, t), \quad (1)$$

其哈密顿量为

$$\hat{H}(x, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - xE(t), \quad (2)$$

$E(t)$ 为激光场的电场分量, $V(x)$ 为势函数.

三维真实氢原子满足的薛定谔方程为

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, t) = \hat{H}(r, t) \psi(r, t), \quad (3)$$

其哈密顿量为

$$\hat{H}(r, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{L^2}{2r^2} - \frac{1}{r} - rE(t) \cos\theta \quad (4)$$

我们对(1)和(3)式采用分裂算符方法求解,求解过程已在文献[17]中详细给出.

2.2. 势函数的构造

为了比较取不同势函数的一维模型原子在激光场中产生高次谐波的差别,首先采用文献[18]中的两个势函数作为参考势函数:

有库仑奇点势函数

$$V_1(x) = -\frac{1}{1+|x|}. \quad (5)$$

软库仑势函数

$$V_2(x) = -\frac{1}{\sqrt{x^2+2}}. \quad (6)$$

它们分别给出的一维模型氢原子基态能量 ϵ_0 都为 0.5 a.u..

本文构造的势函数为

$$V_3(x) = -\frac{1}{\sqrt{ae^{-\frac{x^2}{b}} + (1+ce^{-|x|})x^2}}, \quad (7)$$

a, b, c 为可调参数(Parameter PM),其中参数 a 控制势阱的深度,参数 c 控制势阱的宽度.此势函数在 $x \rightarrow \pm \infty$ 时 $V_3(x) \rightarrow -\frac{1}{|x|}$,满足一维模型氢原子势函数的条件,同时该势函数不存在奇点.在以下计算中势函数 $V_3(x)$ 的每一组参数所对应的一维模型氢原子的基态能量 ϵ_0 均为 0.5 a.u..

三维真实氢原子的势函数为

$$V_4(r) = -\frac{1}{r}. \quad (8)$$

为了与一维模型势函数进行比较,在后面的图中仅绘出三维真实氢原子势函数在 x 轴上的切面.

2.3. 高次谐波的计算

求解(1)和(3)式的含时薛定谔方程,对波函数进行时间演化直到激光场结束,得到体系的含时波函数,运用 Ehrenfest 定理,电子的平均加速度为 $a(t)$.

高次谐波的强度为

$$P(\omega) = |a(\omega)|^2, \quad (9)$$

其中 $a(\omega)$ 是 $a(t)$ 的傅里叶变换.

依赖于时间的电离概率定义为

$$P_{\text{ion}}(t) = 1 - \sum_{\text{bound}} |\phi_n(x)| \psi(x, t)|^2, \quad (10)$$

其中 $\phi_n(x)$ 为束缚态波函数.

3. 计算结果与讨论

为了便于与文献[18]的结果进行比较,在计算中我们使用了与文献[18]相同的激光场及其参数

$$E(t) = E_0 \sin\omega t, \quad (11)$$

其中场强 $E_0 = 0.10 \text{ a.u.}$, 角频率 $\omega = 0.057 \text{ a.u.}$. 在求解含时薛定谔方程时一维氢原子空间区域取为 $|x| \leq 100 \text{ a.u.}$, 三维氢原子空间区域为 $r \leq 100 \text{ a.u.}$.

为了比较不同势阱深度的模型氢原子产生高次谐波的差别,首先调节势函数 $V_3(x)$ 的势阱深度使其略深于势函数 $V_1(x)$ 的势阱,选取的参数为 PM_1 ($a = 0.767, b = 100.0, c = 10.0$),势函数记为 $V_3(x)$ PM_1 .图 1(a)绘出了它们的势函数曲线.此时 $V_3(x)$ PM_1 的势函数曲线在小 x 区域与 $V_1(x)$ 基本接近,但在零点附近低于 $V_1(x)$,在大 x 区域与三维真实

氢原子的势函数曲线接近,即 $V_3(x)PM_1$ 的势函数曲线与 $V_1(x)$ 比较,前者的势阱较深,势阱的宽度较窄,并且势函数 $V_3(x)$ 不存在奇点,其曲线的顶点是光滑的.在图 1(b)中给出了由这两种势函数对应的一维模型氢原子和三维真实氢原子在单个周期激光作用下产生的高次谐波谱.由于势阱较深的势函数 $V_3(x)PM_1$ 对应的一维模型氢原子产生的谐波谱强度整体上高于 $V_1(x)$ 的谐波谱强度,显然势函数 $V_3(x)PM_1$ 对应的一维模型氢原子谐波平台的提高与库仑奇点没有关系. $V_1(x)$ 对应的模型氢原子产生的谐波谱强度在平台的高阶区域高于三维真实氢原子的谐波谱强度,而在平台的低阶区域低于三维真实氢原子的谐波谱强度,此结果与 Gordon 等人的计算结果相同.

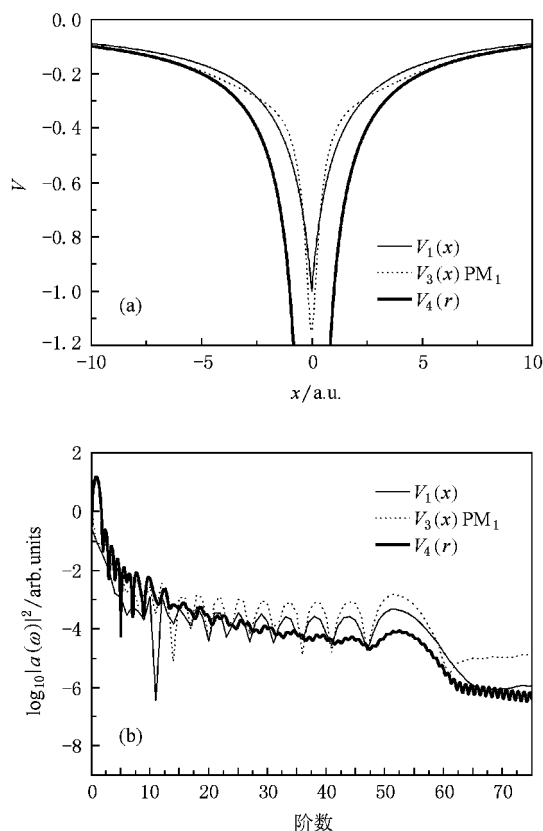


图 1 (a)一维模型氢原子势函数 $V_1(x)$ 和 $V_3(x)PM_1$ 与真实氢原子 $V_4(r)$ 的势函数曲线;(b)单个周期激光作用下势函数 $V_1(x)$ 和 $V_3(x)PM_1$ 的一维模型氢原子与真实氢原子(记为 $V_4(r)$)的高次谐波谱

为了进一步观察势阱深度对谐波谱的影响,现将势函数 $V_3(x)$ 的参数选为 $PM_2(a = 1.0, b = 500.0, c = 7.12)$,势函数记为 $V_3(x)PM_2$.此时势函

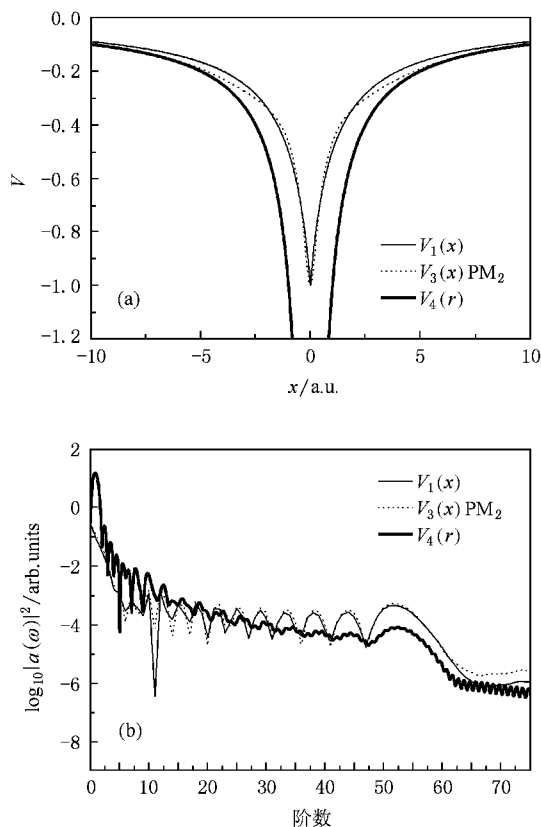


图 2 (a)一维模型氢原子势函数 $V_1(x)$ 和 $V_3(x)PM_2$ 与真实氢原子 $V_4(r)$ 的势函数曲线 (b)单个周期激光作用下势函数 $V_1(x)$ 和 $V_3(x)PM_2$ 的一维模型氢原子与真实氢原子(记为 $V_4(r)$)的高次谐波谱

数势阱变浅,这里选取的参数有意使势函数 $V_3(x)PM_2$ 与势函数 $V_1(x)$ 的势阱深度相同.图 2(a)绘出了相应的势函数曲线,在小 x 区域势函数曲线 $V_3(x)PM_2$ 与 $V_1(x)$ 接近重合,在大 x 区域略低于势函数曲线 $V_1(x)$,且 $V_3(x)$ 在 $x = 0$ 附近无奇点.为了比较势函数引起的高次谐波的变化,在图 2(b)中给出了它们在激光场作用一个周期产生的高次谐波谱.由图可以看出这两种势函数对应的模型氢原子产生的谐波谱在高阶平台区域基本重合,而且由于势函数 $V_3(x)$ 无库仑奇点,这时由 $V_3(x)PM_2$ 给出的势函数曲线近似与具有库仑奇点的势函数 $V_1(x)$ 非常接近重合,特别是在小 x 区域,所得到的高次谐波也基本重合,并没有出现势函数 $V_1(x)$ 的库仑奇点对高次谐波产生实质性的影响.与 $V_3(x)PM_1$ 给出的结果比较,随着势函数 $V_3(x)PM_2$ 势阱的变浅,其对应的高次谐波在平台区域的强度较 $V_3(x)PM_1$ 也有所降低.由此可以推测,势函数曲线的深浅

对高次谐波的强度有较大的影响,为此我们进一步考查势函数的变化对高次谐波的影响.

现将势函数的势阱进一步变浅,将势函数 $V_3(x)$ 参数取为 $PM_3(a=1.4, b=1000.0, c=3.63)$, 势函数记为 $V_3(x)PM_3$. 如图 3(a) 所示, 这时势函数 $V_3(x)PM_3$ 的势阱比 $V_1(x)$ 的势阱进一步变浅, 同时势阱的宽度变宽. 在图 3(b) 中绘出了势函数 $V_3(x)PM_3$ 对应的一维模型氢原子在单个周期激光作用下产生的高次谐波, 其强度也相应地降低. 这组参数的选取有意使一维模型氢原子与真实氢原子的高次谐波平台末端的强度接近. 我们注意到, 当势函数 $V_3(x)PM_3$ 的一维模型氢原子产生的高次谐波在平台的高阶区域与三维真实氢原子产生的谐波强度较接近时, 在低阶区域总存在一些差异.

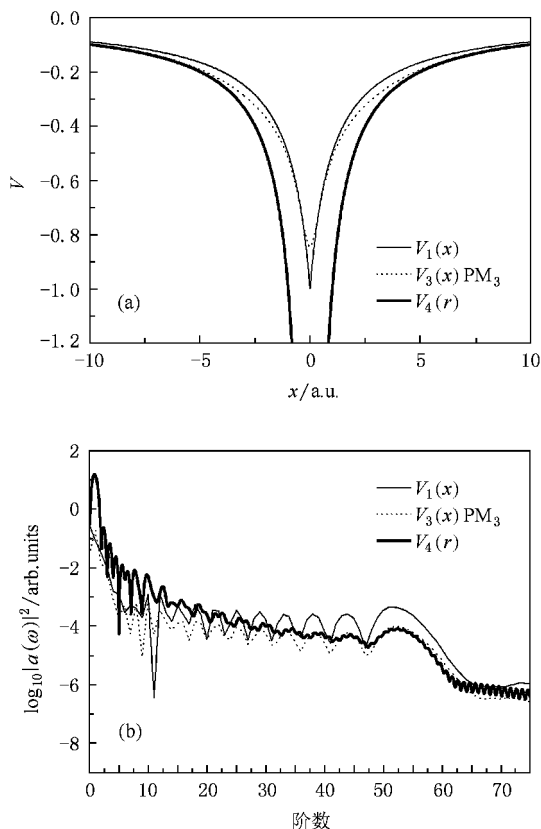


图 3 (a) 一维模型氢原子势函数 $V_1(x)$ 和 $V_3(x)PM_3$ 与真实氢原子 $V_4(r)$ 的势函数曲线 (b) 单个周期激光作用下势函数分别为 $V_1(x)$ 和 $V_3(x)PM_3$ 的一维模型氢原子与真实氢原子 (记为 $V_4(r)$) 的高次谐波谱

为了与通常使用的软库仑势 $V_2(x)$ 的结果进行比较, 势函数 $V_3(x)$ 的参数取为 $PM_4(a=2.0, b=10000.0, c=0.0001)$, 势函数记为 $V_3(x)PM_4$. 如图

4(a) 所示, 这时势函数 $V_3(x)PM_4$ 的势阱再一次变浅, 其势阱宽度继续增加. 由于势函数 $V_3(x)PM_4$ 近似等于势函数 $V_2(x)$, 它们的势函数曲线完全重合. 由图 4(b) 可以看出, 在单个周期激光作用下势函数 $V_3(x)PM_4$ 与 $V_2(x)$ 的模型氢原子产生的高次谐波也完全重合, 而且谐波平台的强度较 $V_3(x)PM_3$ 也显著降低. 值得注意的是, 势函数 $V_2(x)$ 对应的高次谐波谱强度与三维真实氢原子的高次谐波谱强度存在差异, 但是其谐波趋势以及截止位置都与三维真实氢原子的高次谐波符合得很好, 这可以通过将 $V_3(x)PM_3$ (或 $V_2(x)$) 对应的模型氢原子产生的谐波谱向上平移, 从而得到与三维真实氢原子产生的高次谐波一致的结果^[21].

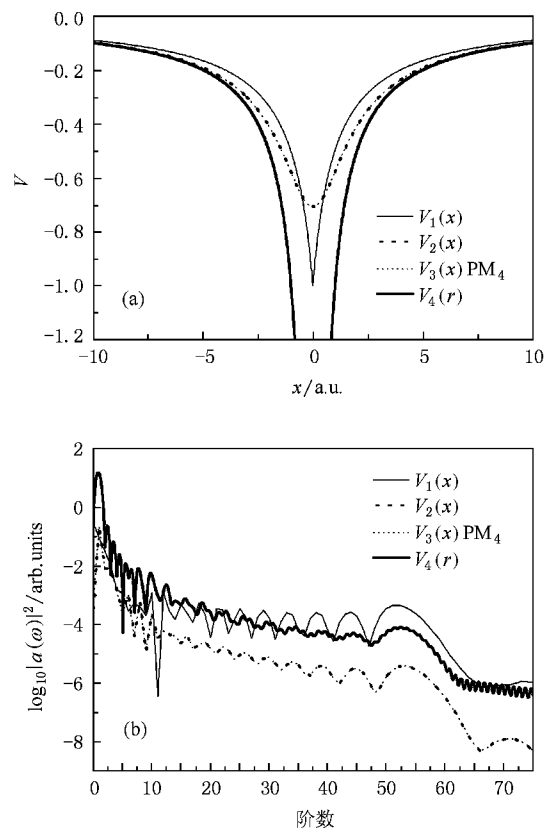


图 4 (a) 一维模型氢原子势函数 $V_1(x)$, $V_2(x)$ 和 $V_3(x)PM_4$ 与真实氢原子 $V_4(r)$ 的势函数曲线 (b) 单个周期激光作用下势函数分别为 $V_1(x)$, $V_2(x)$ 和 $V_3(x)PM_4$ 的一维模型氢原子与真实氢原子 (记为 $V_4(r)$) 的高次谐波谱

由于单个周期的激光场驱动原子产生的高次谐波干涉效应较弱, 并且单个周期的激光场难以在实验上实现, 因此, 为了进一步研究在多个周期激光场作用下势函数对原子产生的高次谐波是否具有类似的

影响,我们又计算了激光场演化 16 个周期时三维真实氢原子与一维模型氢原子产生的高次谐波谱,其中一维模型氢原子的势函数 $V_3(x)$ 分别采用了前面的四组参数.图 5 给出了这四组参数下的计算结果.这时的谐波谱由于干涉效应使得谐波曲线不再像单个

周期激光作用时那样光滑,但是势函数对高次谐波趋势的影响一致,高次谐波的强度是随着其势函数势阱深度的增加而增加.在图 5(b)和(d)中,当势函数 $V_3(x)$ PM_2 与 $V_1(x)$ 及 $V_3(x)$ PM_4 与 $V_2(x)$ 曲线接近重合时,它们的高次谐波谱也符合得很好.

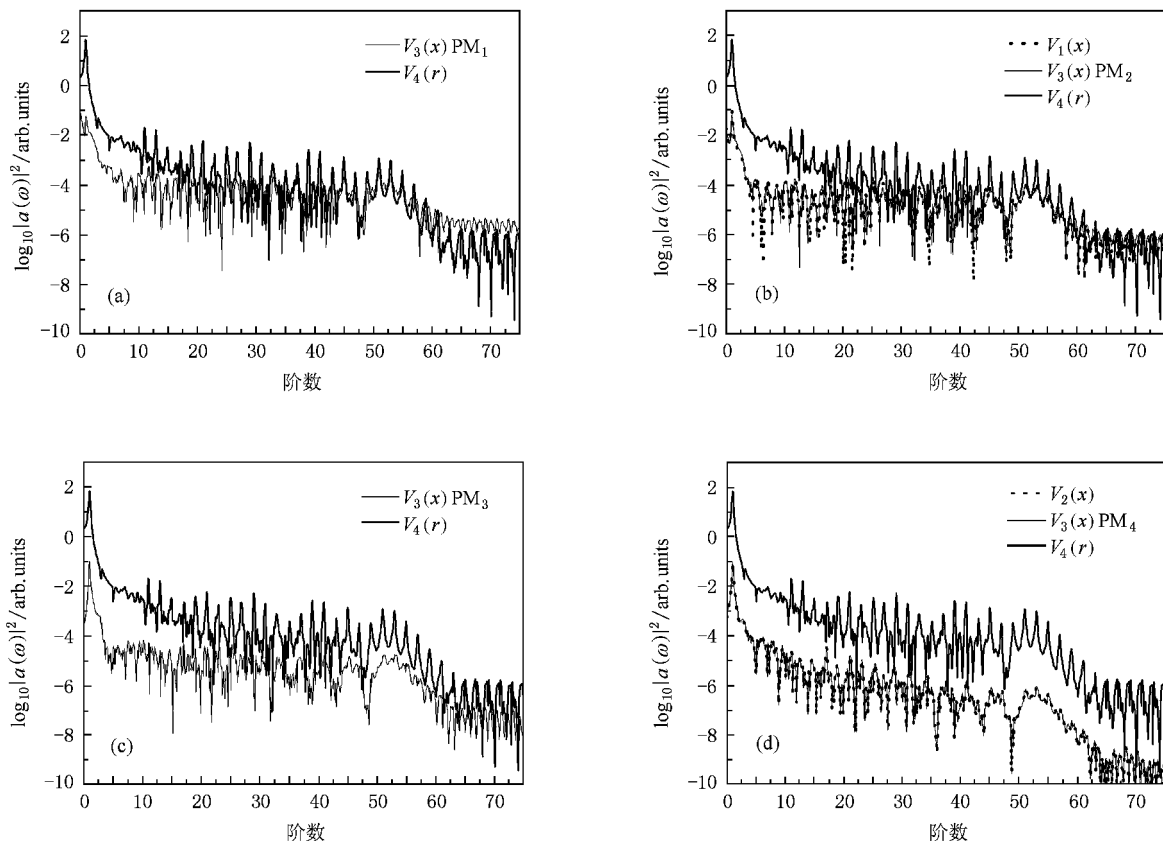


图 5 不同参数势函数对应的模型氢原子与真实氢原子(记为 $V_4(r)$)在 16 个周期激光场作用下产生的高次谐波 (a) 模型氢原子的势函数为 $V_3(x) PM_1$ (b) 模型氢原子的势函数分别为 $V_1(x)$, $V_3(x) PM_2$ (c) 模型氢原子的势函数为 $V_3(x) PM_3$ (d) 模型氢原子的势函数分别为 $V_2(x)$, $V_3(x) PM_4$

根据高次谐波产生的半经典三步模型,原子中的电子首先被电离,然后被电离的电子从激光场中获得动能,最后是有了一定动能的电子与原子核复合,从而发射出高次谐波.这样高次谐波的强度主要受到三个因素的影响,激光场参数、在激光场作用下原子的电离概率和电离到连续态的电子与原子核的复合概率,而电离概率和复合概率与模型原子的势函数有关.为了比较由激光场与原子的一维模型势所形成的势垒,在图 6(a)中给出了激光场电场分量增至最大值(0.10 a.u.)时,参数分别为 PM_1 , PM_2 , PM_3 , PM_4 势函数 $V_3(x)$ 所形成的势垒.由图可以看出,当激光场 $E_0 = 0.10$ a.u. 时,模型氢原子基本上都处于过垒电离状态,这时的核外电子都会很快电离到连

续态.图 6(b)给出了相应 4 组参数的势函数对应的模型氢原子的电离概率.不难看出,它们的电离概率曲线非常接近,不同的势函数对应的模型氢原子电离概率差别较小,因此在过垒电离区域电离概率对高次谐波强度的影响可以近似视为均等.这样在激光场参数相同的条件下,高次谐波的强度就仅仅依赖于势阱的深度.从定性上来说,势阱的深度越深,其电子复合到基态的概率也越大,所发射的高次谐波强度就越强.从前面的数值计算结果来看,也的确如此.势阱较浅的模型氢原子产生高次谐波强度相对较低,而势阱较深的模型氢原子对应着较强的高次谐波谱.因此一维模型氢原子在过垒电离区域产生的谐波强度与势阱的深度有关.由此可见,在激光

场参数相同的情况下,具有相同电离能但取不同势函数的模型氢原子产生的高次谐波强度主要受到电子复合概率的影响.势阱越浅,电子的复合概率越

小,谐波强度较弱,势阱越深,电子的复合概率越大,发射的高次谐波强度也越强,而与势函数是否存在库仑奇点没有关系.

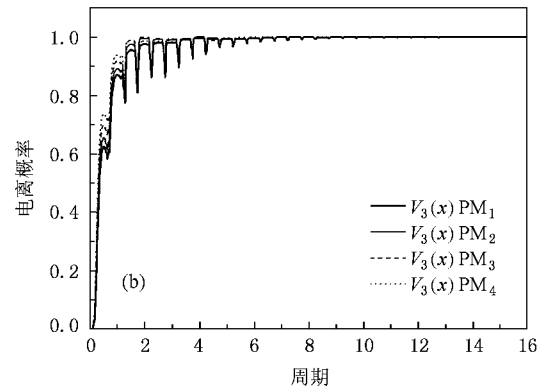
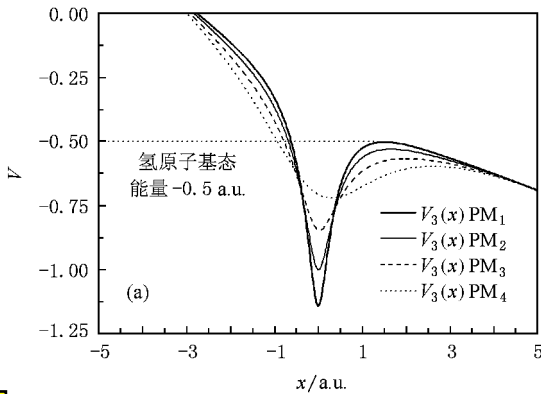


图 6 (a) 激光场正偏振时, 势函数 $V_3(x)$ 参数分别为 PM_1, PM_2, PM_3, PM_4 随空间位置 x 的变化 ($E_0 = 0.10$ a.u.) (b) 势函数为 $V_3(x)$ 参数分别为 PM_1, PM_2, PM_3, PM_4 的一维模型氢原子电离概率比较

4. 结 论

通过构造参数可调且无库仑奇点的一维模型氢原子的势函数 $V_3(x)$, 数值求解原子在强激光场中的含时薛定谔方程, 研究了单个周期和多个周期激光作用下不同参数势函数的一维模型氢原子和三维

真实氢原子的高次谐波. 结果表明: 一维模型氢原子在过垒电离区域产生的高次谐波在平台区域的强度与势函数势阱的深度有关, 势阱越深, 产生的高次谐波在平台区域的强度越强, 势阱越浅, 产生的高次谐波谱强度越低. 由此得到了与文献 [18] 不同的结论, 即一维模型氢原子在强激光场中产生高次谐波的强度与势函数是否存在库仑奇点没有直接关系.

- [1] Ferray M, L'Huillier A, Li X F, Lompre L A, Mainfray G, Manus C 1988 *J. Phys. B* **21** L31
- [2] Reed V C, Burnett K, 1992 *Phys. Rev. A* **46** 424
- [3] Lewenstein M, Balcou P, Ivanov M Y, L'Huillier A, Corkum P B 1994 *Phys. Rev. A* **49** 2117
- [4] Protopapas M, Keitel C H, Knight P L 1997 *Rep. Prog. Phys.* **60** 389
- [5] Zhou X X, Lin C D 2000 *Phys. Rev. A* **61** 053411
- [6] Zheng Y H, Zeng Z N, Li R X, Xu Z Z 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 2243 (in Chinese) [郑颖辉、曾志勇、李儒新、徐至展 2007 物理学报 **56** 2243]
- [7] Hong W Y, Cao W, Lan P F, Lu P X 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6623 (in Chinese) [洪伟毅、曹伟、兰鹏飞、陆培祥 2007 物理学报 **56** 6623]
- [8] Ge Y C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4091 (in Chinese) [葛愉成 2008 物理学报 **57** 4091]
- [9] Bartels R A, Paul A, Green H, Kapteyn H C, Murnane M M, Backus S, Christov I P, Liu Y W, Attwood D, Jacobsen C 2002

Science **297** 376

- [10] Shiraishi T, Mori M, Kondo K 2002 *Phys. Rev. A* **65** 045201
- [11] Agostini P, Dimauro L F 2004 *Rep. Prog. Phys.* **67** 813
- [12] Cheng T W, Li X F, Ao S Y, Wu L A, Fu P M 2003 *Phys. Rev. A* **68** 033411
- [13] Carrera J J, Chu S I 2007 *Phys. Rev. A* **75** 033807
- [14] Eberly J H, Su Q, Javanainen J 1989 *Phys. Rev. Lett.* **62** 881
- [15] Brewczyk M, Rzaewski K 1999 *Phys. Rev. A* **60** 2285
- [16] Rae S C, Chen X, Burnett K 1994 *Phys. Rev. A* **50** 1946
- [17] Zhao S F, Zhou X X, Jin C 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4078 (in Chinese) [赵松峰、周效信、金成 2006 物理学报 **55** 4078]
- [18] Gordon A, Santra R, Kärtner F X 2005 *Phys. Rev. A* **72** 063411
- [19] Gordon A, Kärtner F X 2005 *Optics Express* **13** 2941
- [20] Corkum P B 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 1994
- [21] Li H S, Li P C, Zhou X X 2009 *J. At. Mol. Phys.* **26** 524 (in Chinese) [李会山、李鹏程、周效信 2009 原子与分子物理学报 **26** 524]
- [22] Feit M D, Fleck J A, Steiger A 1982 *J. Comput. Phys.* **47** 412

Role of potential function in high order harmonic generation of model hydrogen atoms in intense laser field ^{*}

Li Hui-Shan^{1,2)} Li Peng-Cheng¹⁾ Zhou Xiao-Xin¹⁾†

¹ *College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China*

² *Teaching and Research Department of Fundamental Courses of Qinghai University, Xining 810016, China*

(Received 18 January 2009 ; revised manuscript received 15 February 2009)

Abstract

By constructing one-dimensional model potential function with variable parameters, we investigate the high order harmonic generation (HHG) of one-dimensional model hydrogen atoms and real hydrogen atom with same ground state energy in 1 cycle and 16 cycles of intense laser fields. Our results show that in the over-barrier ionization region, the intensities of HHG for one-dimensional model atoms with different potential parameters are closely related with the depth of the potential well, but independent of the Coulomb singularity of the potential.

Keywords : intense laser field, one-dimensional model hydrogen atom, model potential, high order harmonic generation

PACC : 3280, 4250

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10674112), the Nuclear Theory Center of HIRFL, the Foundation of Education Department of Gansu Province (Grant No. 0601-23) and The Creative Projection of Northwest Normal University (Grant No. NWNU-KJCXGC-03-21).

† Corresponding author. E-mail : zhouxx@nwnu.edu.cn