

相对论质量修正效应对超高次谐波的影响*

郭福明¹⁾ 陈基根²⁾ 杨玉军¹⁾ 曾思良^{3)†}

1) (吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012)

2) (台州学院物理与电子工程学院物理与材料工程系, 台州 318000)

3) (北京应用物理与计算数学研究所计算物理重点实验室, 北京 100088)

(2012年4月12日收到; 2012年5月29日收到修改稿)

通过分别求解含时狄拉克方程和含时薛定谔方程, 研究了一维模型原子在相对论超强激光脉冲作用下的超高次谐波发射过程. 研究表明: 在弱场强条件下, 相对论的模拟结果可以退化到非相对论的结果; 随着场强的增强, 可以逐渐观察到明显的相对论质量修正效应. 此外, 根据发展的相对论的“三步”模型并结合小波时频分析方法, 分析了谐波平台的截止位置和发射效率.

关键词: 高次谐波, 相对论质量修正效应, 含时 Dirac 方程

PACS: 32.80.Rm, 42.65.Ky, 31.30.J-

1 引言

强场高次谐波 (high-order harmonic generation, HHG) 由于其特征谱呈现独特的平台结构, 即在相当高阶次的谐波仍有一定的发射功率, 因此可以利用它获得相干的极端紫外波段以及 X 射线波段的光源^[1,2], 也是目前人们实现阿秒脉冲的首选光源^[3,4]. 根据“三步”模型^[5], HHG 平台的截止位置约为 $I_p + 3.17U_p$. 这里 I_p 是体系的电离能; $U_p = E^2/4\omega^2$ 是电子在激光场中的有质动力势, 它正比于入射激光的电场强度 E 的平方, 和激光的频率 ω 的平方成反比. 一般认为: 当 U_3 和电子的静止质量能可以相比拟的时候, 或者离子的有效核电荷数超过 20 时, 必须在理论建模中考虑相对论效应^[6]. 通常的相对论效应包括: 磁场效应、多极效应、质量修正效应、自旋效应等等.

从原则上讲, 所有相对论效应都能在含时 Dirac 方程 (time dependent Dirac equation, TDDE) 的理论框架下加以描述. 除了早期一些研究是寻求

某些特定情况下的解析解以外, 目前理论工作主要的努力方向之一是如何数值地精确求解 TDDE 动力学过程. 尽管人们在这个领域已经取得了一些重要的进展, 但是时至今日, 直接数值求解外场中的三维 TDDE 依然是一个非常具有挑战性的任务.

鉴于直接数值求解三维 TDDE 的困难, 人们提出很多近似方案来处理原 (离) 子在超强激光中的动力学过程: 1) 相对论强场近似模型^[7], 一般仅考虑基态的贡献, 对于连续态电子仅考虑激光场的作用, 忽略原子势的影响. 2) 经典或半经典模型^[8], 用经典粒子系综模拟量子波包, 该方案被用来研究电离动力学, 无法准确描述量子的弥散和相干效应. 3) 缩减维度计算方案^[9,10], 能得到定性甚至是半定量的结果. 4) 求解相对论修正的含时薛定谔方程^[11], 但该方法仅仅适用于弱相对论的范畴. Hu 等人利用该方法研究了非隧穿的高次谐波发射机理以及磁相互作用、旋轨耦合等相对论修正项对高次谐波发射等过程的影响^[11].

据我们所知, 还没有工作专门讨论相对论质量修正效应对 HHG 的影响. 本文将通过求解一维

* 国家自然科学基金 (批准号: 10904006, 11034003, 11105015, 11075023), 浙江省自然科学基金 (批准号: Y6110578) 和中国工程物理研究院科学技术发展基金 (批准号: 2011B0102026, 2011A0102007) 的资助课题.

† E-mail: siliang.zeng@gmail.com

的 TDDE 来研究这一问题. 值得指出的是: 超强激光的磁场作用会导致电子沿激光传播方向发生洛伦兹漂移, 该效应会显著降低 HHG 的发射效率. 这是一维模型无法描述的. 实验上可以通过用一对强度、频率和偏振方向均相同的对向传播的超强脉冲共同形成驻波场来抵消磁场的效应^[11]. 这时一维模型仍然是合理的近似. 本文的主要目的是定量阐明相对论质量修正效应对超高次谐波发射的影响, 回答经典的“三步模型”能否准确地预言相对论超高次谐波的截止位置. 实际上, 理论上理解高次谐波发射过程应当包括: 微观和宏观两个过程. 这两个过程分别对应于原子在激光场中的非线性响应以及在介质中传播的所有原子的谐波的相干叠加. 这里, 我们仅限于讨论谐波发射的单原子响应.

如无特殊说明, 本文均采用原子单位 (a.u.).

2 理论方法

在长度规范和偶极近似下, 激光场与原子相互作用的含时 Schrödinger 方程 (time dependent Schrödinger equation, TDSE)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi^{\text{SE}}(x, t) = \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V(x) + x \cdot E(t) \right] \psi^{\text{SE}}(x, t), \quad (1)$$

此处的 $V(x)$ 为电子感受到的静电相互作用势, $E(t)$ 为激光电场, $\psi^{\text{SE}}(x, t)$ 是满足 TDSE 的电子波函数. 本文采用对称分拆快速傅里叶方案求解 TDSE, 具体的计算细节, 可参考文献 [12].

相应的 TDDE 为

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi^{\text{DE}}(x, t) = \left\{ c \hat{\alpha} \left[-i \frac{\partial}{\partial x} + A(x, t) \right] + V(x) + c^2 \hat{\beta} \right\} \psi^{\text{DE}}(x, t), \quad (2)$$

其中 $\hat{\alpha}$ 和 $\hat{\beta}$ 为 Dirac 矩阵, c 为真空中的光速, $A(x, t)$ 为电磁场的矢势, $\psi^{\text{DE}}(x, t)$ 是四分量的 Dirac 波函数. 仍然采用对称分拆快速傅里叶方案进行数值求解, 具体的计算细节, 主要参考文献 [9].

选择软核库仑势描述原子核对电子的吸引,

$$V(x) = -Q / \sqrt{x^2 + A}. \quad (3)$$

为了不失讨论的一般性, 这里 $Q = 12$, $A = 0.014$, 相应的体系基态能量为 -72 . 激光脉冲的电

场形式为

$$E(t) = E_0 \cos [\omega(t - t_m/2) + \varphi] \times \exp \left[-4 \ln(2) \frac{(t - t_m/2)^2}{\sigma^2} \right]. \quad (4)$$

E_0 是激光电场的峰值强度, ω 是激光脉冲的中心频率, t_m 是激光脉冲总的持续时间, φ 是激光脉冲的相位, σ 是激光脉冲包络的半高全宽. 本文计算中选择 $\omega = 1$, $t_m = 6\pi$ 和 $\sigma = t_m/3$. 在计算中, 选择的范围是 $[-800, 800]$, 空间步长为 0.0122 , 时间步长为 0.0000157 , 为了避免波函数在空间的反射, 采用了 $\cos^{1/8}$ 的面具函数^[13,14]. 得到了体系的相对论和非相对论形式的含时波函数后, 可以分别计算出各个时刻的长度和加速度形式的偶极矩, 例如,

$$\begin{aligned} d_L^{\text{SE}}(t) &= \langle \psi^{\text{SE}}(x, t) | x | \psi^{\text{SE}}(x, t) \rangle, \\ d_A^{\text{SE}}(t) &= \langle \psi^{\text{SE}}(x, t) | -\frac{dV_a(x)}{dx} - E(t) | \psi^{\text{SE}}(x, t) \rangle. \end{aligned} \quad (5)$$

对计算得到的含时偶极矩做傅里叶变换, 可以得到高次谐波的发射功率谱^[17]

$$\begin{aligned} P_L(\omega) &= \left| \int d_L(t) e^{-i\omega t} dt \right|^2, \\ P_A(\omega) &= \left| \frac{1}{\omega^2} \int d_A(t) e^{-i\omega t} dt \right|^2. \end{aligned} \quad (6)$$

为了研究高次谐波发射的时间特性, 可以对相应的偶极矩做 Morlet 小波变换. 对于某次谐波, 其发射强度随着时间的变化可以表示为^[15-17]

$$d_\omega(t) = \left| \int d(t') F_{t,\omega}(t') dt' \right|^2, \quad (7)$$

其中小波变换的核为 $F_{t,\omega}(t') = \sqrt{\omega} W[\omega(t' - t)]$, 其形式为

$$W(x) = \frac{1}{\sqrt{\tau}} e^{ix} e^{-\frac{x^2}{2\tau^2}}, \quad (8)$$

这里 $\tau = 10$. 为了分析经典的“三步模型”能否准确地预言相对论超高次谐波的截止位置. 本文还发展了相对论的“三步模型”, 该模型的基本方程是朗道的相对论经典场运动方程. 根据非相对论的“三步模型”, 电子电离后在强激光场作用下加速度、速度和位移满足牛顿方程

$$\ddot{x}(t) = -E(t), \quad (9a)$$

$$\dot{x}(t) = \int_{t_{ini}}^t -E(t') dt', \quad (9b)$$

$$\begin{aligned}
 x(t) &= \int_{t_{ini}}^t \dot{x}(t') dt' \\
 &= \int_{t_{ini}}^t \int_{t_{ini}}^{t'} -E(t'') dt'' dt'. \quad (9c)
 \end{aligned}$$

对于相对论的“三步模型”,需要对上述电子速度进行相对论修正,即

$$\dot{x}_R(t) = \dot{x}(t) \cdot c / \sqrt{c^2 + \dot{x}(t)^2}. \quad (10)$$

对应的电子动能为

$$E_R^k(t) = \frac{c^2}{\sqrt{1 - \frac{\dot{x}_R^2(t)}{c^2}}} - c^2. \quad (11)$$

3 结果与分析

为了检验电子波函数的数值精度与求解 TDDE 程序的准确性. 图 1 分别给出了加速度和长度两种形式下,求解 TDDE 和 TDSE 的高次谐波发射功率谱. 由于在加速度形式下,近核区的波函数对计算的数值误差相对敏感;而在长度形式下,则是远核区的波函数对误差较为敏感. 因此,人们经常通过检查不同规范形式下谐波发射功率谱的符合程度,来评估波函数的数值精度. 从图 1 中可以看到,两种规范下的谐波功率谱完全符合,这表明所求得的含时波函数在近核区和远核区均有很高的精度. 图 1 中,靶离子的有效核电荷数为 12,激光场电场的峰值强度为 10,可以预期相对论效应并不重要. 从图中亦可观察到 TDDE 和 TDSE 模拟得到的谐波谱的差别微小. 换言之,我们 TDDE 的模拟结果,在低能极限下,与 TDSE 的结果相一致. 这是合理的,也是程序准确性的一个佐证.

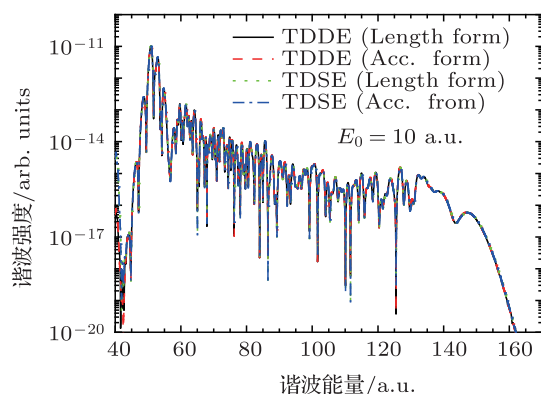


图 1 TDDE 与 TDSE 计算的长度形式和加速度形式的高次谐波发射功率谱 (激光电场峰值强度为 $E_0 = 10$ a.u., 激光频率为 1 a.u.)

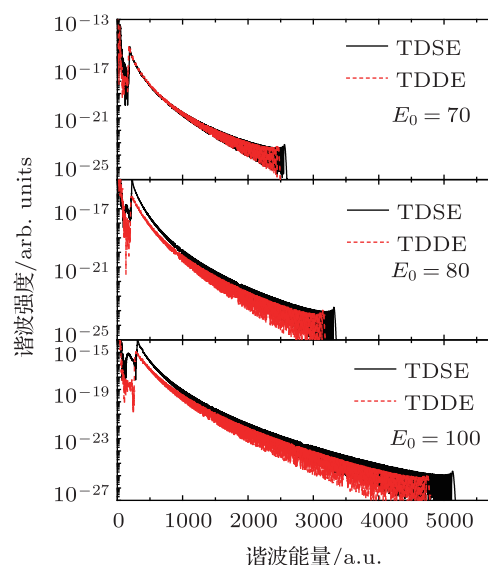


图 2 TDDE 与 TDSE 计算的高次谐波功率谱 (峰值电场强度分别为 70, 80, 100 a.u., 激光频率为 1 a.u.)

为了研究相对论质量修正效应对谐波谱的影响,图 2 中给出了激光电场的峰值强度分别为 70, 80 和 100 时高次谐波的发射功率谱,其中实线为 TDSE 模拟的结果,虚线为 TDDE 模拟的结果. 从图中可以观察到:在低场强时,TDDE 和 TDSE 给出的谐波发射效率基本相当. 随着场强的增强,TDDE 给出的谐波发射效率总是低于 TDSE 给出的结果. 一般来说,谐波的发射效率主要取决于两个因素^[16,17]: 1) 仅仅与原子的结构相关的偶极相互作用. 这个因素和具体的激光参数无关. 2) 各个量子态随时间的布居. 这个因素和具体的动力学息息相关. 考虑到在低场强时,TDDE 和 TDSE 的发射谱的效率基本一致,因此可以推论:当场强比较小的时候,无论是 TDDE 的模拟还是 TDSE 的模拟,仅与原子的结构相关的偶极相互作用大体相当. 各个量子态随时间的布居的情形也是如此. 随着场强的增强,与激光参数无关的偶极相互作用并未随之发生改变. 另一方面,TDSE 模拟的电离产额比 TDDE 模拟的电离产额要大一些^[18]. 从纯经典的图像来看,在相同的激光场条件下,非相对论电子可以加速得更快,跑得更远,更容易挣脱原子核的束缚. 图 3 分别给出了电离电子波包在强激光场作用下的坐标和动量的平均值. 在激光脉冲的上升沿,电离很小,相对论和非相对论的结果接近,随着激光脉冲的强度增加,相对论质量修正效应变得越来越重要,从图 3 中可以清晰地看到:TDDE 和 TDSE 两种方法计算得到的电离电子波包动量和位移平均值的差异. 换言之,量子力学的模拟印

证了纯经典的图像. 因此, 综合考虑两方面的因素可以定性解释图 2 中红线和黑线发射效率的不同.

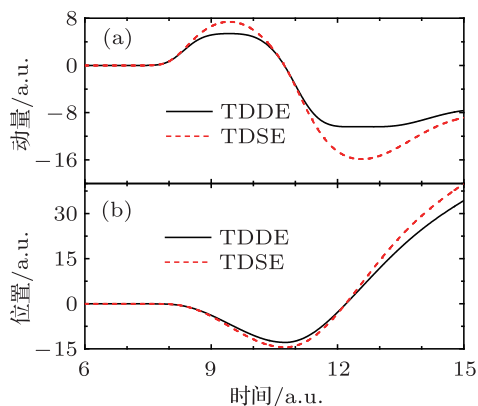


图 3 电离电子波包动量平均值 $\langle P \rangle$ 和坐标平均值 $\langle x \rangle$ 随时间的变化 (激光电场峰值强度为 $E_0 = 10$ a.u., 激光频率为 1 a.u.)

从图 2 中还可以观察到: 随着入射光强的增加, TDSE 和 TDDE 模拟计算得到的谐波发射截止能量差值逐渐加大, 能观察到显著的相对论效应. 当电场场强为 100 时, 非相对论和相对论给出的截止位置分别达到了 5129 和 4743 次. 电子在超强激光场驱动下高速运动, 由于相对论性的质量修正效应所导致高能电子加速不利, 因此 TDDE 给出的谐波截止位置总是小于 TDSE 模拟得到的结果. 图 4 中给出了半经典的非相对论和相对论“三步模型”计算得到的谐波辐射随复合时刻变化的曲线, 如图中的空心圆和空心三角曲线所示. 与图 2 对比结果表明: 量子力学模拟的谐波截止位置与半经典的理论预测结果相符. 从图 4 中, 相对论和非相对论两组经典模拟比较的结果来看: 对于低次谐波, 两种模拟得到的谐波发射时间差别较小, 随着谐波次数逐步提高, 质量修正效应渐渐增强, 谐波发射时间的差别也越来越大. 在截止位置附近, 最大的时间差接近 12 as.

图 5 给出了利用小波变换方法对谐波谱 (图 2 中的 $E_0 = 100$ 谱线) 进行了时频分析. 从图 5 同样可以清楚地观察到: 相对论模拟结果的截止位置远小于非相对论的模拟结果; 当谐波次数大于 1500 次之后, 对于同一阶次谐波发射的效率而言, 非相对论的模拟结果效率偏高; 在谐波发射的时间上, 两者最大的差别大约为 0.4 个原子单位. 无论是经典的“三步模型”, 还是量子力学的时频分析均表明: 在超高次谐波中, 可以观察到明显的相对论效应. 因此, 在超强激光脉冲条件下, 利用超高次谐波对阿秒脉冲进行优化控制时, 有必要考虑相对论质

量修正效应对超高次谐波的影响.

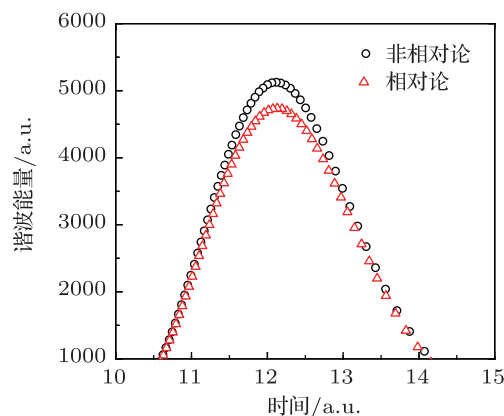


图 4 入射激光电场峰值幅 $E_0 = 100$ a.u. 时, 半经典计算的相对论 (三角) 和非相对论 (圆圈) 的谐波辐射能量随时间的变化关系

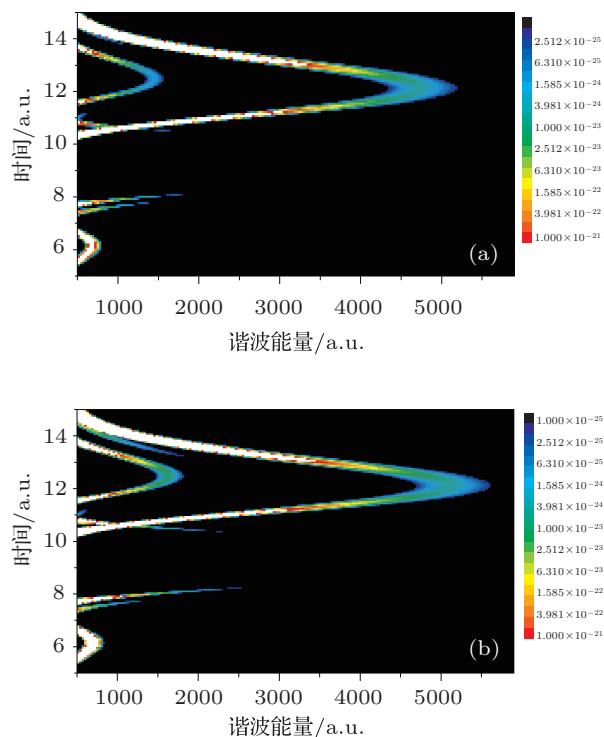


图 5 $E_0 = 100$ a.u. 条件下, 相对论和非相对论的高次谐波发射的时间频率行为

为了定量描述相对论质量修正效应对超高次谐波截止频率的影响, 我们引入一个比值 $(E_{\text{non}} - E_{\text{re}})/E_{\text{re}}$. 这里, E_{non} , E_{re} 表示分别在非相对论和相对论情形下给出的谐波截止频率. 图 6 给出了该比值随有质动力势 U_p 的变化关系. 图 6 中的实线和三角形分别对应经典“三步”模型的结果和量子计算的结果. 二者符合得很好, 相对论的“三步模型”可以预言相对论超高次谐波的截止频率. 随着场强的增强, 可以预期量子力学效应

会随之减弱. 粒子的运动更趋向于经典行为. 因此我们可以利用半经典计算估计相对论质量修正对谐波截止频率的影响. 当 U_p 小于 0.1 倍电子的静止质量能时, 相对论质量修正效应很弱; 随着 U_p 逐渐增大, 质量修正效应也越来越强; 当 U_p 接近 $0.5c^2$ 时, 相对论质量修正效应的影响约为 30%.

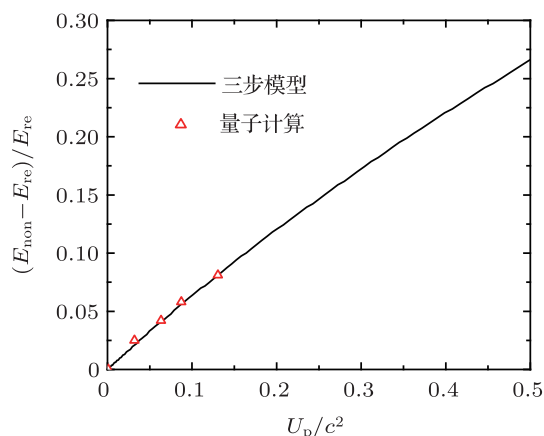


图6 $(E_{\text{non}} - E_{\text{re}})/E_{\text{re}}$ 随有质动力势的变化关系 (其中实线为经典计算, 三角形为量子计算的结果)

4 结论

综上所述, 本文分别通过数值求解一维 TDSE 和 TDDE, 并结合时频分析技术和相对论的“三步”模型, 研究了模型原子在相对论超强激光脉冲作用下的超高次谐波发射过程, 定量阐明了相对论质量修正效应对超高次谐波发射的影响. 为了检验数值波函数在整个位型空间的数值精度, 我们比较了速度和加速度两种形式的高次谐波发射功率谱. 研究表明: 在弱场强条件下, 相对论的模拟结果和非相对论的结果符合. 随着场强的增强, 相对论效应逐渐明显. 通过求解 TDSE 得到的结果会高估谐波的发射效率和谐波的平台区截止位置. 谐波平台区的截止位置, 符合相对论“三步”模型的预测. 随着场强的进一步增强, 当 U_p 接近 0.5 倍的电子静止质量能时, 相对论质量修正效应的影响接近 30%. 相关的研究结果对超高次谐波的优化控制和阿秒脉冲的制备有一定的借鉴意义.

- [1] Ferray M, L'Huillier A, Li X F, Lompre L A, Mainfray G, Manus C 1988 *J. Phys. B* **21** L31
- [2] Itatani J, Levesque J, Zeidler D, Niikura H, Pepin H, Kieffer J C, Corkum P B, Villeneuve D M 2004 *Nature* **432** 867
- [3] Agostini P, DiMauro L F 2004 *Rep. Prog. Phys.* **67** 813
- [4] Krausz F, Ivanov M 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 163
- [5] Corkum P B 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 1994
- [6] Milosevic N, Krainov V P, Brabec T 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 193001
- [7] Avetissian H K, Markossian A G, Mkrtchian G F 2011 *Phys. Rev. A* **8** 013418
- [8] Ye D F, Xin G G, Liu J, He X T 2010 *J. Phys. B* **43** 235601
- [9] Mocken G R, Keitel C H 2008 *Comput. Phys. Commun.* **178** 868
- [10] Zhou Z Y, Zhao Z X, Yuan J M 2011 *Phys. Scr.* **T144** 014048
- [11] Hu S X, Keitel C H 2001 *Phys. Rev. A* **63** 053402
- [12] Guo F M, Yang Y J, Jin M X, Ding D J, Zhu Q R 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 053201
- [13] Chen J G, Yang Y J, Yu X P, He L J, Xu Y Y 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 053206 (in Chinese) [陈基根, 杨玉军, 俞旭萍, 何龙君, 徐圆圆 2011 物理学报 **60** 053206]
- [14] Chen J G, Yang Y J, Chen Y 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 033202 (in Chinese) [陈基根, 杨玉军, 陈漾 2011 物理学报 **60** 033202]
- [15] Zeng S L, Zou S Y, Yan J 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 053202
- [16] Chen J G, Zeng S L, Yang Y J 2010 *Phys. Rev. A* **82** 043401
- [17] Chen J G, Yang Y J, Zeng S L, Liang H Q 2011 *Phys. Rev. A* **83** 023401
- [18] Kylstra N J, Ermolaev A M, Joachain C J 1997 *J. Phys. B* **30** L449

Mass shift effect on relativistic high-order harmonic generation*

Guo Fu-Ming¹⁾ Chen Ji-Gen²⁾ Yang Yu-Jun¹⁾ Zeng Si-Liang^{3)†}

1) (*Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun 130012, China*)

2) (*Department of Physics and Materials Engineering, College of Physics and Electronic Engineering, Taizhou University, Taizhou 318000, China*)

3) (*Science and Technology Computation Physics Laboratory, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

(Received 12 April 2012; revised manuscript received 29 May 2012)

Abstract

By solving the time-dependent Dirac and Schrödinger equations, we investigate the super high-order harmonic generation (HHG) from a one-dimensional model atom in a relativistic intense laser pulse. Our numerical simulations show that the relativistic results can be degraded to non-relativistic ones in the weak laser field, and the clear effect of the relativistic mass-shift can be gradually observed as the increase of the laser field intensity. Furthermore, the cutoff frequency and the emission efficiency of the HHG spectrum are analyzed by the wavelet time-frequency analysis and the relativistic “three-step” model.

Keywords: high harmonic generation, relativistic mass-shift, time-dependent Dirac equation

PACS: 32.80.Rm, 42.65.Ky, 31.30.J-

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10904006, 11034003, 11105015, 11075023), the Natural Science Foundation of Zhejiang Province (Grant No. Y6110578), and Science and Technology Funds of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 2011B0102026, 2011A0102007).

† E-mail: siliang.zeng@gmail.com