

一维含时薛定谔方程的数值求解及其在 强场高次谐波中的应用

李学信 徐至展 汤 燕

(中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

(1995 年 12 月 29 日收到; 1996 年 5 月 13 日收到修改稿)

通过数值求解一维含时薛定谔方程, 得到了不同强度激光作用下原子的电离概率和谐波辐射谱. 讨论了原子的电离与谐波辐射之间的竞争与联系, 并且指出在某一强度范围内原子呈现出电离稳定性或电离抑制现象, 在这个强度范围内非常有利于原子的谐波辐射.

PACC: 4250

1 引 言

薛定谔方程一直是研究原子和外场相互作用的重要手段之一, 然而除了极少数特殊情况外, 很难得到薛定谔方程的解析解, 因此在实际计算中主要用数值方法求解. 数值解主要有两种, 一种是三维含时薛定谔方程(3DTDSE)的数值解^[1], 另一种为一维含时薛定谔方程(1DTDSE)的数值解^[2,3]. 比较符合实际情况的当然为 3DTDSE, 它不仅能研究线偏振光的作用, 还能研究圆偏振和椭圆偏振光的作用. 然而, 对于这样一个四维变量方程进行数值求解是非常困难的, 只能在大型计算机上进行. 由于受到计算条件的限制, 也为了利用简单的模型得到比较合理的结果, 人们自然想到了 1DTDSE. 当然, 利用 1DTDSE 只能研究线偏振光的作用. 下面我们将指出, 只要对一维势表达式进行适当的考虑, 可以使一维势反映出真实的三维势特点, 这样对线偏振光而言, 用一维方程和三维方程将得到一致的结论.

2 一维定态薛定谔方程的数值解

在进行数值求解之前先讨论一维势的选取问题. 对于三维势有 $V(r) = -\frac{1}{r} = -\frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}$, 从三维空间来看, 必须设法去除 $r=0$ 这一点, 也就是说只要 x, y, z 不同时为零, 数值计算将不会遇到什么困难. 对于一维势, 如果仍然取 $V(x) = -\frac{1}{|x|}$, 那么, 数值计算中必须去除 $x=0$ 的点. 为克服数值计算中的困难, 可以把势的形式取为 $V(x) = -\frac{b}{\sqrt{a^2 + x^2}}$ ^[2], 可以看到, 数值计算中将不会出现 $x=0$ 时的计算困难,

适当调整 a, b 的值, b 值可改变势的深度, 而 a 可以考虑三维空间中 y, z 两个分量的影响. 这样不仅能解决计算中的困难, 同时也适当地考虑了三维空间中另外两个变量的影响. 这只是一模型势, 并不针对任何真实原子, 调节 a, b 值可以得到想要的原子势. 计算中, 我们将取 $b = a = 1$, 有了一维势的表示式, 将得到如下的定态薛定谔方程(原子单位):

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} \right) \Psi(x) = \epsilon \Psi(x), \quad (1)$$

其中 ϵ 为本征能量, $\Psi(x)$ 为本征波函数, 通过数值求解方程(1), 可以得到一系列本征能量 ϵ_n 和本征函数 $\Psi_n(x)$. 计算时只需求出束缚态本征能量及相应的本征波函数, 基态波函数是数值求解含时薛定谔方程的初始条件, 求得基态能量为 -0.67 au .

3 一维含时薛定谔方程的数值解

外激光场具有如下形式:

$$E(t) = Ef(t) \sin \omega t, \quad (2)$$

其中 $f(t)$ 为脉冲包络, 可以根据情况选取, 在我们的计算中为

$$f(t) = \begin{cases} \sin^2 \frac{t\pi}{2t_1}, & 0 \leq t \leq t_1, \\ 1, & t_1 < t < t_2, \\ \sin^2 \frac{(t_3 - t)\pi}{2(t_3 - t_2)}, & t_2 \leq t \leq t_3. \end{cases} \quad (3)$$

有外场时的薛定谔方程为

$$i \frac{\partial \Psi(t, x)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{\sqrt{1+x^2}} + xEf(t) \sin \omega t \right) \Psi(t, x). \quad (4)$$

求解的方法是利用前面求出的基态波函数作为初始条件, 然后数值求解方程(4), 可以得到各个时刻总的波函数 $\Psi(x_i, t_j)$, 根据求得的波函数 $\Psi(x_i, t_j)$ 可以得到电偶极矩的期待值

$$d(t_j) = \sum_i \Psi^*(x_i, t_j) x_i \Psi(x_i, t_j) \delta x, \quad (5)$$

其中 x_i 和 t_j 分别为数值计算中的第 i 个空间点和第 j 个时间点, δx 为空间步长. 对 $d(t_j)$ 进行傅里叶变换可得到光辐射振幅

$$d(\Omega) = \sum_j d(t_j) e^{-i\Omega t_j} \delta t, \quad (6)$$

δt 为时间步长, 而 $|d(\Omega)|^2$ 就是相应的光谱强度, 利用求得的任一时刻总的波函数 $\Psi(x_i, t_j)$ 和无外场时的束缚态波函数, 可以得到任何时刻电子在束缚态上出现的概率, 电子在连续态上出现的概率即为电离概率.

4 计算结果

我们分别对 $\omega = 0.086$ 和 $\omega = 0.2$ 两种频率的入射光进行了计算, 得到了完全相似的

结果. 计算时, 取脉冲宽度为 40 个光周期, 上升沿和下降沿各有 5 个周期, 中间稳定振幅期间为 30 个光周期, 谐波计算是在稳定振幅期间进行的, 电离是在整个作用时间内计算的, 而电子的概率分布是在第 20 个周期 ($\omega=0.086$) 计算的. 对 $\omega=0.086$ 的入射激光, 在不同强度下的电离概率、电子概率分布和谐波辐射分别如图 1、图 2 和图 3 所示.

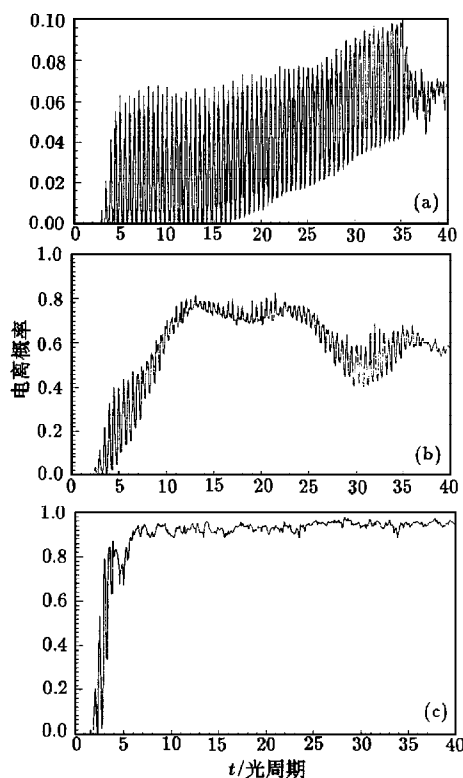


图 1 对 $\omega=0.086$ 的入射激光, 不同强度下的电离概率分布 (a) $E=0.05$, (b) $E=0.09$, (c) $E=0.2$

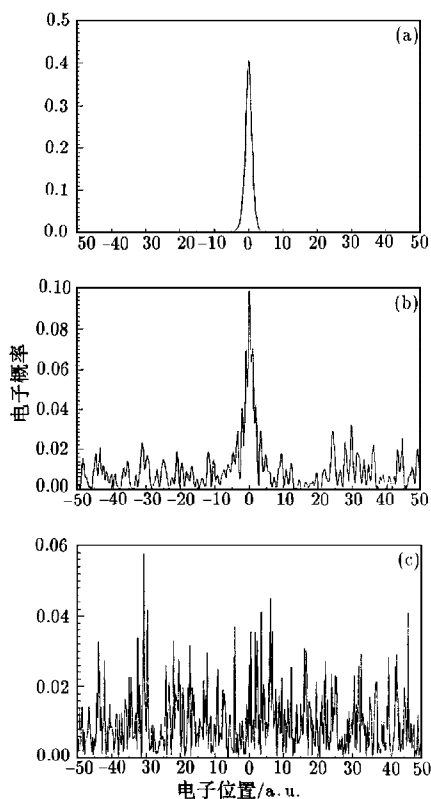


图 2 对 $\omega=0.086$ 的入射激光的电子概率分布 (a) $E=0.05$, (b) $E=0.09$, (c) $E=0.2$

5 讨 论

图 1 中的 (a), (b), (c) 分别对应 $E=0.05, 0.09$ 和 0.2 场强下的电离概率, 由图 1(a) 可以看出电离概率随时间逐渐增大, 而图 1(b) 中的电离概率却出现了电离稳定性和电离抑制现象, 图 1(c) 中的电离概率几乎很快达到了 90% 以上. 由图 2(a), (b), (c) 对应的电子概率分布可以看出, $E=0.05$ 时电子主要在原子核附近, $E=0.09$ 时电子处于原子核附近的概率也很大, $E=0.2$ 时电子处于核附近的概率很小. 由图 3(a), (b), (c) 可以看出, 当 $E=0.05$ 时谐波辐射已很强, 当 $E=0.09$ 时, 谐波次数最高, 当 $E=0.2$ 时, 根本没有谐波信号. 可以看出原子的电离和光辐射之间确实存在着某些内在联系. 我们看到当 $E=0.09$ 时电离概率呈现出稳定性, 这时的谐波次数最多, 这是我们得到的结果, 到目前

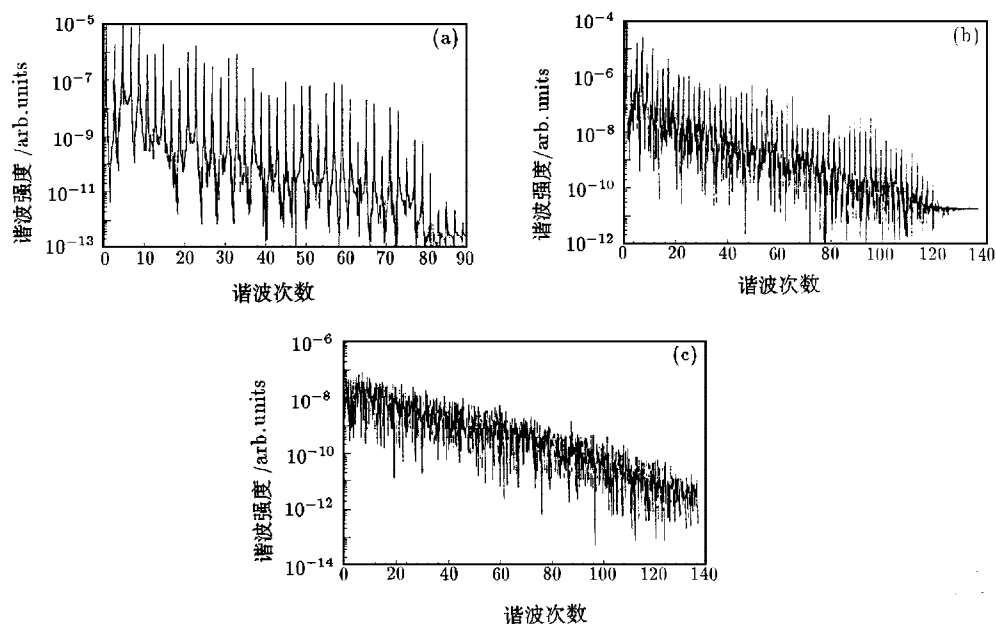


图3 对 $\omega=0.086$ 的入射激光,不同强度下的谐波辐射 (a) $E=0.05$, (b) $E=0.09$, (c) $E=0.2$

为止,对于谐波辐射与这种电离稳定性之间的关系还未见报道.虽然也有不少人在研究原子的电离抑制或原子稳定性问题^[4,5],但他们只是研究外场很强时,在非常高的频率下(实际上还没有那么强的高频光源),原子的电离随光强增加而下降的现象.那时不仅无谐波辐射,而且稳定时间也很短.这里我们看到的现象是一种真正光频激光作用下,当强度不是太强时原子的时间稳定性.我们认为这是一个动态稳定性,也正是这种稳定性非常有利于谐波辐射.谐波辐射的根源在于电子从高能级到低能级的跃迁,而对于能量大于原子电离能的光子只能是从连续态到束缚态的跃迁产生的,原子的电离稳定期间只能表明原子的电离从束缚态到连续态的跃迁概率和从连续态到束缚态的跃迁概率相等,正是这种连续态到束缚态的跃迁产生了高次谐波.只有在某一强度范围内才会具有电离稳定性,当外场较弱时,电离随时间呈上升趋势,而当外场很强时,电子突然被电离而成为真正的自由电子,电子不能回到束缚态,只有在某一强度范围内,才会出现电子从束缚态到连续态和从连续态到束缚态的跃迁概率相等,使电离呈现稳定性而产生很高能量的光子.计算中能获得高次谐波的激光强度范围和实验^[6,7]中真正观察到高次谐波的范围相一致,大致在 $I=10^{14}-10^{15}\text{W}/\text{cm}^2$ 附近,因此,可以认为计算的结果是合理的.

下面我们只考虑一个束缚态和一个连续态来定性分析电离概率与谐波辐射的关系, $d(t) = c_b(t) c_f(t) \langle c_b | x | c_f \rangle + \text{c. c.}$, 电离概率与 $|c_f(t)|^2$ 成正比,而谐波信号与 $|c_b(t)|^2 |c_f(t)|^2$ 成正比.电离概率太大或太小都不利于谐波辐射.对于两能级系统,显然 50% 的电离最有利于谐波辐射,由于并非真正的两能级系统,所以电离不一定正好为 50%,而是在其附近的某一范围内,这和我们的数值解相一致.

- [1] J. L. Krause, K. J. Schafer and K. C. Kulander, *Phys. Rev. Lett.*, **68**(1992), 3535.
- [2] J. H. Eberly, Q. Su and J. Javanainen, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989), 881.
- [3] K. Burnett, P. L. Knight, B. R. M. Piraux *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **66**(1991), 301.
- [4] V. C. Reed, P. L. Knight and K. Burnett, *Phys. Rev. Lett.*, **67**(1991), 1415.
- [5] M. Pont and M. Gavrila, *Phys. Rev. Lett.*, **65**(1990), 2362.
- [6] J. J. Macklin, J. D. Kmetec and C. L. Gordon, III, *Phys. Rev. Lett.*, **70**(1993), 766.
- [7] A. L'Huillier, and P. Balcou, *Phys. Rev. Lett.*, **70**(1993), 774.

THE NUMERICAL SOLUTION AND ITS APPLICATION IN STRONG FIELD HIGH ORDER HARMONIC GENERATION OF ONE DIMENSIONAL TIME DEPENDENT SCHRÖDINGER EQUATION

LI XUE-XIN XU ZHI-ZHAN TANG YAN

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica, Shanghai 201800)

(Received 29 December 1995; revised manuscript received 13 May 1996)

ABSTRACT

By solving the 1-dimensional time-dependent schrödinger equation, the ionization probability and harmonic spectra of atom under different laser intensities are obtained, and the relation between the ionization and harmonic emission is discussed. The result is that under certain range of laser intensity during which the ionization is stable or suppressed, the harmonics will be emitted efficiently.

PACC: 4250