

双色场中高次谐波转化效率提高的数值研究*

张春丽¹⁾ 祁月盈²⁾ 刘学深³⁾ 丁培柱³⁾

1) 许昌学院电信学院, 许昌 461000)

2) 嘉兴学院机电学院, 嘉兴 314000)

3) 吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012)

(2008 年 8 月 16 日收到, 2008 年 9 月 11 日收到修改稿)

采用渐近边界条件和辛算法数值求解了双色激光场分别与模型 Pöschl-Teller 势和模型 He⁺ 相互作用的含时 Schrödinger 方程的无穷空间初值问题, 计算了电离概率、电子平均位移、高次谐波与跃迁概率, 数值结果显示, 添加适当的倍频光的双色激光场使高次谐波转化效率极大提高, 并给出定性与定量分析.

关键词: 辛算法, 双色激光场, 高次谐波, 定量分析

PACC: 3280, 4250

1. 引言

随着强场物理研究的进展, 人们得到了很多提高高次谐波转化效率的方法^[1-4]. 通过定性分析知道, 双色场和适当的初态能使连续态和束缚态间的跃迁更加畅通, 以致能放出更多的高能光子从而提高高次谐波的转化效率, 但只能给出定性的分析. 对于一种提高高次谐波转化效率的方案, 到底能提高多少, 如何去分析它, 这将是本文所要完成的工作.

本文中应用渐近边界条件^[5]将激光场中模型 Pöschl-Teller 势和模型 He⁺ 的含时 Schrödinger 方程的无穷空间初值问题转化为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^[6]数值求解^[7-9], 进而计算电子的平均位移、基态和第一激发态的布居概率、谐波谱、发射特定级次谐波的跃迁概率和, 探索和研究了双色场极大地提高高次谐波转化效率的机理, 并对高次谐波转化效率的提高给出定性和定量分析.

2. 理论方法

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

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

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

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

描述, 其中 $\epsilon(t)x$ 是激光场与原子的相互作用势, $\epsilon(t)$ 是激光场电场强度; $V_0(x)$ 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)^[10].

由于原子势是短程速降的, 在充分远的 R 处利用渐近边界条件^[5]

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

其中 $A(t) = -\int_0^t \epsilon(t) dt$, $\alpha(t) = \int_0^t A(t) dt$, $q(t) = \int_0^t A^2(t) dt$, 将求解强激光场中 1 维模型原子的无穷

* 国家自然科学基金(批准号: 10574057, 10571074), 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: chunlizhang0601@yahoo.com.cn

空间初值问题转化为求解有界空间的初边值问题

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

$$(-R \leq x \leq R, 0 \leq t \leq T),$$

$$\Psi(\pm R, t) = \tilde{\Psi}(\pm R, t), (0 \leq t \leq T),$$

$$\Psi(x, 0) = \Phi(x), (-R \leq x \leq R). \tag{5}$$

初边值问题(5)可以离散成 Hamiltonian 显含时间的有限维可分 Hamilton 正则方程组的初值问题,可用辛格式求解^[7].应用求得的 $|x| < R$ 上的数值解和 $|x| \geq R$ 上的 $\tilde{\Psi}(x, t)$ 即可研究激光场中的激发、电离和高次谐波发射等.

计算中双色激光场电场形式取为

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

其中 ϵ_0 为激光场电场强度峰值, ω_0 为基频光频率, r 为倍频光与基频光的强度比, n 为倍频光倍数, $f(t) = \sin^2(\omega_0 t/2N)$ 为脉冲包络.

3. 数值结果与讨论

3.1. 短程模型 Pöschl-Teller 势

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

计算参数分别为 $\epsilon_0 = 0.04$ a.u., $\omega_0 = 0.055$ a.u., $N = 8$ 为光学周期数,空间边界取为 $R = 300$ a.u..计算了单色场($r = 0$)和添加 6 倍频光的双色场($r = 0.2, n = 6$)下电子的平均位移、基态和第一激发态的布居概率、谐波谱和发射 12, 13, 14 次谐波的跃迁概率和.结果如下:

基于高次谐波发射的三步模型^[11]:第一步电子

在激光场的作用下跃迁到连续态;第二步电子在连续区中运动并从激光场继续获得能量;第三步连续区中的电子以一定概率在激光场反向作用下返回束缚态并放出高能光子即发射高次谐波.电子平均位移曲线从零经峰(谷)值回到零相应于完成一次三步过程.图 1 是电子分别在单色场(虚线)和双色场(实线)中的平均位移(为了更明显地比较两者的频率和振幅将双色场中的结果除以 5).图 2 是单色场和双色场中基态与第一激发态的布居概率.图 3 分别是单色场和双色场中电子的平均位移、基态和第一激发态的布居概率(为了使图像更加清晰,将平均位移缩小为 1/10,基态的布居概率下移一个单位).从图 3 中看出,电子平均位移曲线的振荡与基态和第一激发态布居概率的振荡完全同步,电子平均位移曲线从零经峰(谷)回到零相应于电子基态(第一激发态)布居概率从多(少)到少(多)再到多(少)的过程,即电子完成一次三步过程.这样就可以通过电子的平均位移来分析高次谐波的转化效率.

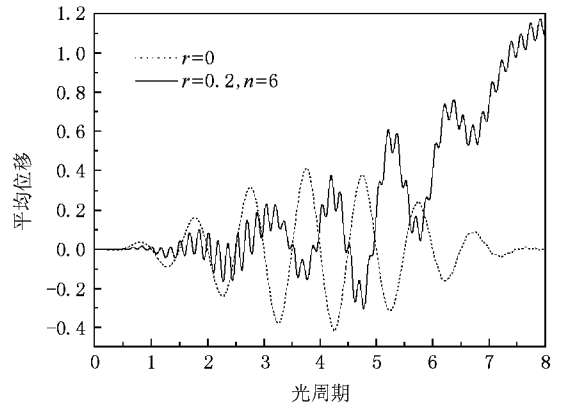


图 1 单色场中(点线)和双色场中(实线)电子的平均位移 $\times 0.2$

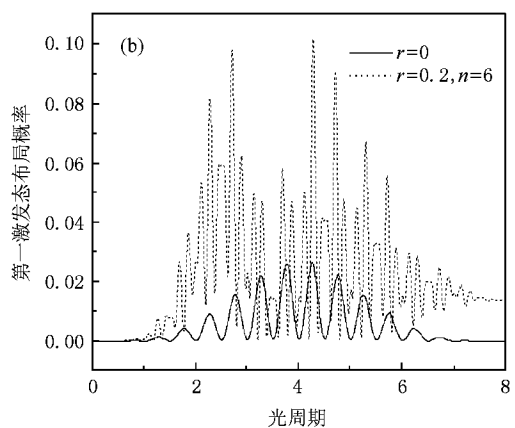
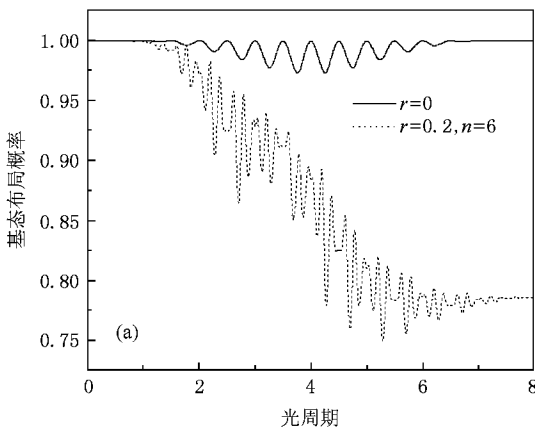


图 2 单色场(实线)和双色场(虚线)中电子的基态布居概率(a)与第一激发态布居概率(b)

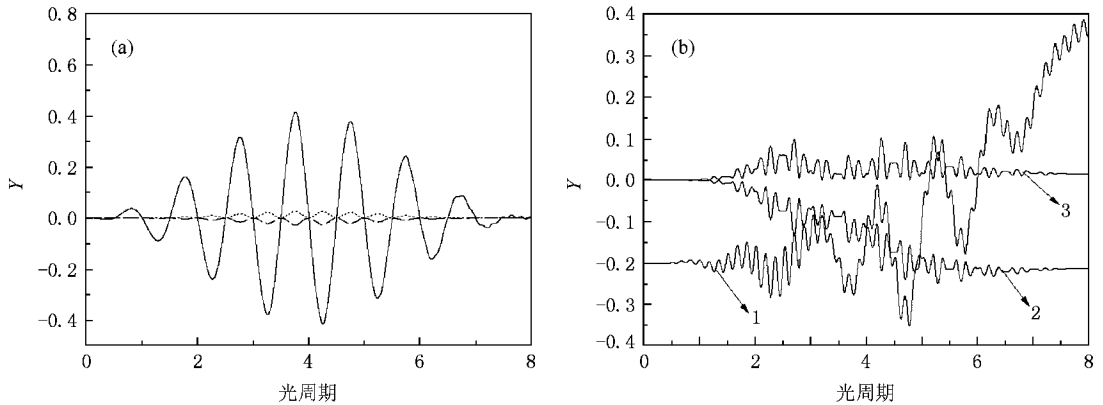


图 3 (a) 单色场下电子的平均位移 $\times 0.1$ (实线), 基态的布居概率 -1 (虚线), 第一激发态的布居概率 (点线) (b) 双色场下电子的平均位移 $\times 0.1$ (曲线 1), 基态的布居概率 -1 (曲线 2), 第一激发态的布居概率 (曲线 3)

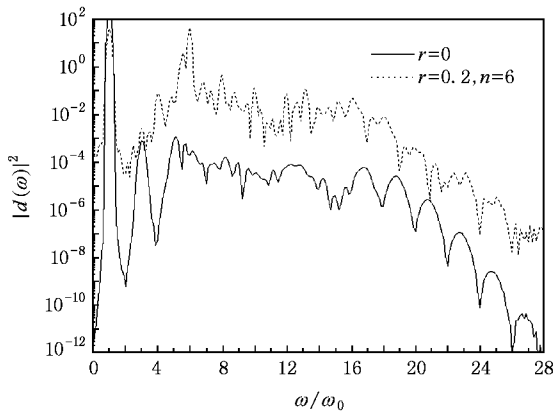


图 4 单色场 (实线) 和添加 6 倍频光的双色场 (虚线) 中的高次谐波谱

电子的平均位移越大意味着电子在连续态的布居概率越大, 则当其返回束缚态完成一个三步过程时能放出更多的高能光子; 电子平均位移振荡的越快则在相同的作用时间内能完成更多的三步过程, 这两个因素共同决定了高次谐波转化效率提高的数值, 下面分析具体的计算结果。

从图 1 看出, 在单色场中电子的平均位移较小, 说明电子以较大的概率束缚在原子核附近, 只以很小的概率在激光场的作用下跃迁到连续态并带着高能量返回, 电子在单色场中基态布居概率进一步证实了我们的分析 (图 3(a) 中的实线); 与单色场相比添加 6 倍频光的双色场中电子的平均位移的振幅增大 (约是单色场的 5 倍), 即电子以大得多的概率跃迁到连续态, 与电子在双色场中基态布居概率曲线相对应 (图 3(a) 中的点线); 从图 1 中还看出, 电子在双色场中振荡频率约是单色场的 6 倍, 即双色场

使电子在相同的时间内能完成更多的三步循环, 图 2 显示出与图 1 相同的规律, 双色场中基态与第一激发态布居概率的振荡次数和振荡幅度远大于单色场, 即与单色场情形相比双色场中的电子更快地以更大的概率从连续态跃迁返回束缚态。

由于图 3 显示的基态和第一激发态与电子的平均位移具有完全同步的振荡, 电子的平均位移曲线从零经峰 (谷) 回到零相应于电子基态 (第一激发态) 布居概率从多 (少) 到少 (多) 再到多 (少) 的过程, 即电子完成一次三步过程, 我们也可以得到这样的结论: 电子基态和第一激发态的布居概率振荡的振幅越大、振荡的频率越大那么在相同的作用时间内就能放出越多的高能光子。

以平均位移为例来分析, 双色场中由于电子平均位移振荡加快, 约是单色场的 6 倍, 并且振幅约增大 5 倍, 这两个因素共同决定了谐波转化效率的提高, 所以高次谐波转化效率能提高 30 倍左右, 同时单色场中的振荡大多发生在束缚态间, 只对低频谐波发射有贡献, 所以转化效率提高的倍数应该大于 30。

图 4 是单色场 (实线) 和双色场 (虚线) 中的谐波谱, 从图中看出, 双色场中谐波谱的低级次部分与单色场相同, 平台区较单色场提高了 2—3 个数量级, 与我们从电子平均位移的分析中得到的大于 30 是一致的。

根据三步模型理论, 从电子平均位移上分析能对高次谐波转化效率的提高给出比较粗糙的数值, 这较定性分析已经近了一步。

我们计算了单色场和双色场经历一个脉冲后发射 12, 13, 14 次谐波的跃迁概率和, 所得数值列在表 1 中, 与图 4 中的高次谐波平台高度 (转化效率) 提

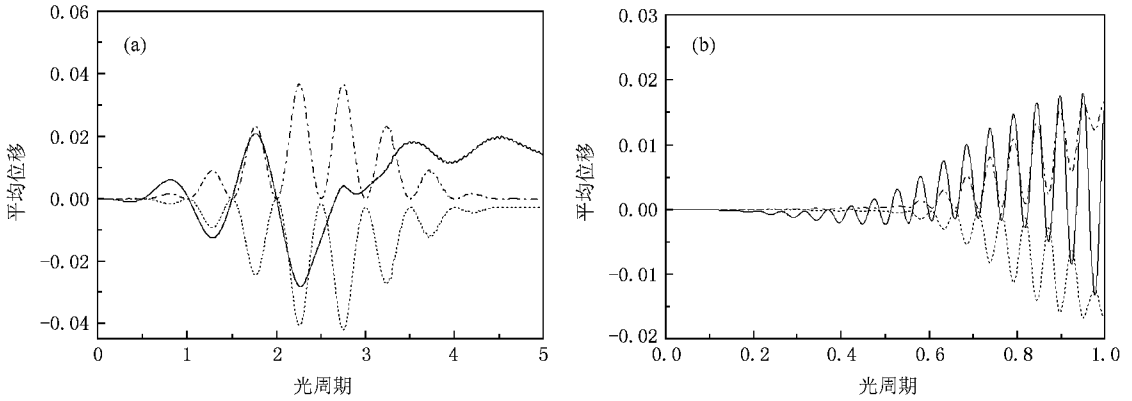


图 5 (a)单色场 ($r=0$)和(b)双色场 ($r=0.1, n=19$)中电子的平均位移 $\times 0.1$ (实线)基态的布居概率-1(点线),第一激发态的布居概率(虚线)

高的数量级是一致的。

表 1 双色场与单色场中产生高次谐波的跃迁概率之和

谐波(ω/ω_0)	12	13	14
双色场/ 10^{-5}	2.93	3.94	2.524
单色场/ 10^{-8}	5.61	8.77	4.75
双色场/单色场/ 10^2	5.2	4.49	5.3

3.2. 模型 He^+

$$V_0 = -\frac{2}{\sqrt{x^2 + 0.5}}$$

参数选为 $\epsilon_0 = 0.3 \text{ a.u.}$, $r\omega_0 = 0.056 \text{ a.u.}$, $rN = 5$, $R = 500 \text{ a.u.}$, 计算了单色场 ($r=0$)和添加 19 倍频光的双色场 ($r=0.1, n=19$)下的电子的平均位移、基态和第一激发态的布居概率、谐波谱和发射 240—249 次谐波的跃迁概率和。其结果如下。

图 5 显示出了与图 3 同样的规律,即分别在单色场和双色场中电子的平均位移、基态布居概率与第一激发态布居概率具有完全同步的振荡:电子的平均位移曲线从零经峰(谷)回到零相应于电子基态(第一激发态)布居概率从多(少)到少(多)再到多(少)而且双色场中的振荡频率远大于单色场中的振荡频率。

图 6 是单色场(实线)和双色场(点线)中电子的平均位移曲线在前 1.5 个光学周期上的放大。为了便于比较将单色场中的结果放大了 4 倍。可以看到双色场中电子平均位移的振荡频率约是单色场中的 18 倍,这样双色场使高次谐波转化效率能提高 72 倍左右。图 7 是模型 He^+ 分别在单色场中(实线)和双色场中(虚线)的谐波谱,可以看到高次谐波的转化效率提高了将近 2 个数量级,接近从平均位移上

分析的 72 倍。

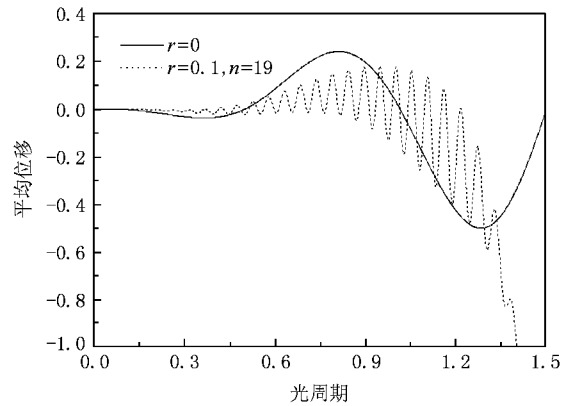


图 6 单色场中(实线) $\times 4$ 和双色场中(点线)电子的平均位移

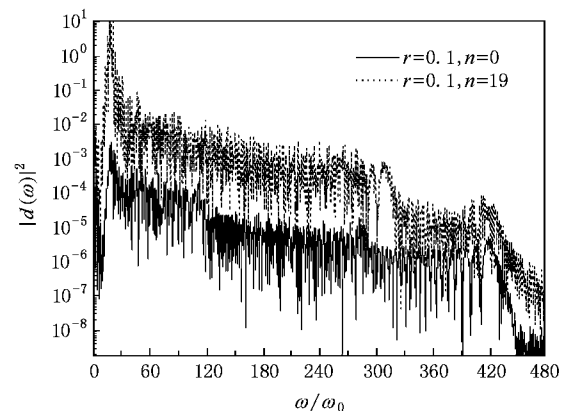


图 7 单色场(实线)和添加 19 倍频光的双色场(虚线)中的高次谐波谱

表 2 是单色场和双色场经历一个脉冲后发射 240—249 次谐波的跃迁概率和,所得数值与图 7 中高次谐波平台高度(转化效率)提高的数量级是一致的。

表 2 双色场与单色场中高次谐波平台高度(产生效率)的比较

谐波	240	241	242	243	244	245	246	247	248	249
单色场/ 10^{-8}	3.51	3.4	3.44	3.26	3.28	3.07	2.98	3.07	2.81	2.94
双色场/ 10^{-6}	2.55	2.58	2.53	2.43	2.35	2.28	2.3	2.18	2.04	2.08
双色场/单色场	138	132	136	134	140	135	130	141	138	141

4. 结 论

本文通过数值研究精确地分析了添加适当倍频光的双色场使高次谐波平台提高几个数量级的原因;6倍频光和19倍频光的频率分别为0.33 a.u.和1.064 a.u.,非常接近于模型 Pöschl-Teller 势的第一激发态与基态的能级差0.32 a.u.和模型 He^+ 的第一激发态与基态的能级差1.068 a.u.,从基态经单光子即可激发到第一激发态;第一激发态布居概

率增大使得束缚态向奇宇称连续态跃迁的通道更加畅通,双色场的高次谐波平台提高,再一次证实了文献 [12—14] 等的定性解释;电子分别在单色场和双色场中的平均位移、基态布居概率与第一激发态的布居概率具有完全同步的振荡,可以通过电子的平均位移对高次谐波的转化效率的提高给出比较粗糙数量,进一步说明了三步模型对研究强激光场原子物理是重要和基本的,通过对发射特定级次谐波的跃迁概率和的计算能给出高次谐波转化效率提高的具体量级,这对高次谐波的研究是一个飞跃.

- [1] Watson J B, Sanpera A, Chen X, Burnett K 1996 *Phys. Rev. A* **53** R1962
- [2] Wang B B, Cheng T W, Li X F, Fu P M 2004 *Chin. Phys. Lett.* **21** 1727
- [3] Ishilawa K 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 043002
- [4] Kim I J, Kim H T, Kim C M *et al* 2004 *Appl. Phys. B* **78** 859
- [5] Qi Y Y, Liu X Y, Ding P Z 2003 *Chin. J. Comp. Phys.* **20** 377 (in Chinese) [祁月盈、刘晓艳、丁培柱 2003 计算物理 **20** 377]
- [6] Feng K 1986 *J. Comput. Math.* **4** 279
- [7] Qi Y Y, Liu X S, Liu X Y, Ding P Z 2006 *J. Math. Chem.* **39** 133
- [8] Zhang C L, Liu X S, Qi Y Y 2006 *J. Math. Chem.* **39** 451

- [9] Qi Y Y, Liu S X, Liu X Y, Li P X, Ding P Z 2005 *High Power Laser and Particle Beams* **17** 1824 (in Chinese) [祁月盈、刘世兴、刘晓艳、李平雪、丁培柱 2005 强激光与粒子束 **17** 1824]
- [10] Hu S X, Xu Z Z 1997 *Phys. Rev. A* **56** 3916
- [11] Kuchiev M Y, Ostrovsky V N 1999 *Phys. Rev. A* **60** 3111
- [12] Schumacher D W, Weihe F, Muller H G, Bucksbaum P H 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 1344
- [13] Wu H T, Xu Z Z 2000 *Acta Opt. Sin.* **20** 440 (in Chinese) [吴海涛、徐至展 2000 光学学报 **20** 440]
- [14] Zhou X X, Li B W 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1902 (in Chinese) [周效信、李白文 2001 物理学报 **50** 1902]

Numerical study of the enhancement of efficiency of high-order harmonic generation in two-color laser field^{*}

Zhang Chun-Li^{1)†} Qi Yue-Ying²⁾ Liu Xue-Shen³⁾ Ding Pei-Zhu³⁾

1) *Electric and Information engineering College , Xuchang University , Xuchang 461000 , China)*

2) *School of Electrical Engineering , Jiaxing University , Jiaxing 314000 , China)*

3) *Institute of Atomic and Molecular Physics , Jinlin University , Changchun 130012 , China)*

(Received 16 August 2008 ; revised manuscript received 11 September 2008)

Abstract

The time-dependent Schrödinger equations (TDSE) of the interaction of two-color laser pulse with Pöschl-Teller potential and He^+ are solved by using the asymptotic boundary condition and symplectic algorithm. The population of ionization , average distance , high-order harmonic generation (HHG) and population of transition are calculated. The numerical results show that the conversion efficiency of HHG is enhanced in the two-color laser fields , then the qualitative and quantitative analysis for the enhancement of conversion efficiency of HHG are given.

Keywords : symplectic algorithm , two-color laser fields , high-order harmonic generation , quantitative analysis

PACC : 3280 , 4250

^{*} 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).

[†] Corresponding author. E-mail : chunlizhang0601@yahoo.com.cn