

# H 离子团簇高次谐波平台展宽与团簇膨胀

张春艳<sup>1)2)†</sup>

1) (陕西师范大学物理学与信息技术学院, 西安 710119)

2) (湖北民族大学智能科学与工程学院, 恩施 445000)

(2023 年 4 月 5 日收到; 2023 年 8 月 15 日收到修改稿)

通过数值求解强激光场与二维模型 H 离子团簇相互作用的含时薛定谔方程, 发现 H 离子团簇产生的高次谐波平台比单个 H 原子产生的高次谐波平台要宽. 建立了研究团簇产生高次谐波的经典模型, 研究发现经典模型计算结果与含时薛定谔方程结果能很好的对应, 同时指出高次谐波平台拓展的原因在于母核周围其他离子产生的库仑势场的作用, 并给出由此产生的离子间距改变对高次谐波截止能量的影响, 为观测团簇膨胀提供了一种可能途径.

**关键词:** 高次谐波, 团簇, 库仑势, 膨胀**PACS:** 42.65.Ky, 36.40.Vz, 41.75.Jv**DOI:** 10.7498/aps.72.20230534

## 1 引言

强激光场与物质相互作用产生的高次谐波由于其广阔的应用前景, 如分子轨道层析成像<sup>[1,2]</sup>、探测非对称分子取向及结构<sup>[3,4]</sup>、重构晶体跃迁偶极矩<sup>[5,6]</sup>、产生阿秒脉冲<sup>[7-10]</sup>、产生极紫外和软 X 射线<sup>[11,12]</sup>等, 引起了物理学相关领域的广泛关注. 原子气体与强超短激光脉冲相互作用产生高次谐波的机制可由 Corkum<sup>[13]</sup>的三步模型解释, 即电离、加速、回复过程. 高次谐波谱具有如下的典型结构: 高次谐波的效率首先随着谐波阶次的增加而迅速衰减, 随后谐波效率会在一段区域内保持不变形成一个平台结构, 最后达到一定的阶次时谐波效率会陡然截止.

强激光场与原子<sup>[14-18]</sup>、分子<sup>[19,20]</sup>及固体<sup>[21-25]</sup>相互作用产生高次谐波一直是研究者们重点关注的课题. 而团簇作为研究原子、分子跨越到固体的桥梁逐渐引起科学家们的重视<sup>[26-28]</sup>. 与单原子相比, 强激光场与团簇相互作用能产生更高的光子产

量<sup>[29,30]</sup>和更高的截止能量<sup>[31,32]</sup>. 一些数值研究指出, 强激光场与团簇相互作用产生的光子能量超过了  $I_p + 8U_p$ <sup>[33,34]</sup>, 但这一结果与实验相违背<sup>[31,32]</sup>. 然而, 产生一个远高于通常的  $I_p + 3.17U_p$  的截止点被证明是存在的<sup>[30]</sup> ( $I_p$  表示电离能,  $U_p$  表示有质动力能).

关于团簇能延展高次谐波平台的机理, 一直是一个比较有争议的话题<sup>[35-37]</sup>. 相关的理论研究指出, 团簇产生高能高次谐波是电子与整个团簇的重组产生<sup>[28]</sup>或电子与相邻离子复合产生<sup>[38,39]</sup>. 而部分小组在实验<sup>[40]</sup>及理论<sup>[41]</sup>中指出, 无论团簇类型及大小, 团簇辐射高次谐波的过程主要是电子与母核复合导致的.

基于 Bodi 等<sup>[40]</sup>的实验结果, 本文将强激光场与团簇相互作用产生高次谐波分为 3 个过程, 即内电离、电子经典运动、与母体离子复合, 并通过准经典方法研究强激光场与团簇相互作用发生内电离后电子的动力学行为, 与文献<sup>[33, 42]</sup>不同, 本文在研究电子的动力学行为时, 考虑了团簇库仑势的影响. 并将经典计算结果与含时薛定谔方程

† 通信作者. E-mail: 2012004@hbmzu.edu.cn

(TDSE) 计算结果进行比较, 发现二者能较好的符合. 同时考察了高次谐波平台延展的原因及离子间距对高次谐波截止能量的影响. 本文在无特殊说明情况下都使用原子单位制, 即  $\hbar = m_e = e = 1$ , 其中  $\hbar$ ,  $m_e$  和  $e$  分别表示普朗克常量、电子质量和电子电荷量.

## 2 理论模型

### 2.1 数值求解含时薛定谔方程

本文采用单活电子近似模型, 忽略其他电子影响, 即单电子暴露在激光场、母核离子及簇内其他离子所产生的库仑场中<sup>[43]</sup>. 本研究假设 H 原子即母核位于网格中心, 其他 H 离子位于每一个正方形网格的交叉点上, 母核周围的离子个数为  $N_g = (2N+1)^2 - 1$ , 其中  $N$  为正整数, 其结构示意图如图 1 所示. 强激光场与二维模型 H 离子团簇的相互作用, 可以通过数值求解含时薛定谔方程来描述:

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

式中  $\psi(x, y, t)$  表示与系统哈密顿量  $H(x, y, t)$  对

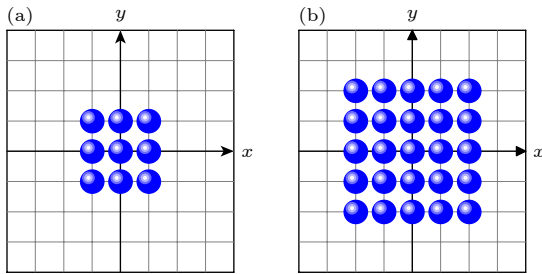


图 1 二维模型团簇结构示意图 (a)  $H^{8+}$  结构示意图; (b)  $H^{24+}$  结构示意图

Fig. 1. Schematic diagram of cluster structure of two-dimensional model: (a) Structure diagram of  $H^{8+}$ ; (b) structure diagram of  $H^{24+}$ .

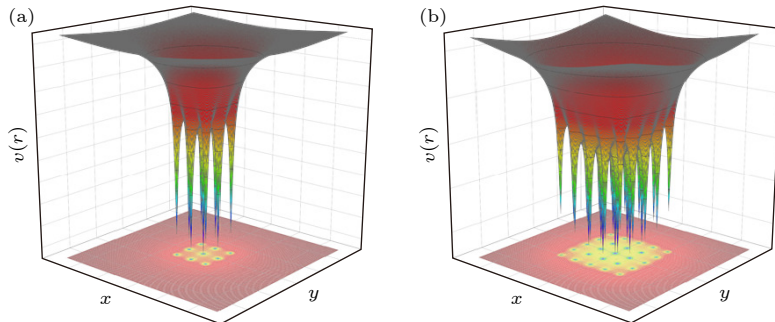


图 2 团簇的势能曲面 (a)  $H^{8+}$  势能曲面; (b)  $H^{24+}$  势能曲面.

Fig. 2. Potential energy surface of cluster: (a) The potential energy surface of  $H^{8+}$ ; (b) the potential energy surface of  $H^{24+}$ .

应的含时波函数; 系统哈密顿量的表达式为

$$H(x, y, t) = -\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial y^2} + \mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r} + V(x, y), \quad (2)$$

其中,  $E(t)$  为激光场,  $V(x, y)$  为 H 离子团簇的势能,  $\mathbf{r}$  表示电子相对于坐标原点的位置. 对于给定结构的模型团簇其势能形式为

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^n \frac{-Z_i}{\sqrt{\xi + r_i^2}}, \quad (3)$$

其中  $n$  表示团簇所包含的离子个数,  $Z_i$  表示有效电荷,  $\xi$  表示软心势参数,  $r_i = \sqrt{(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)^2}$  表示电子与第  $i$  个离子的距离 ( $\mathbf{R}_i$  表示第  $i$  个离子相对于原点的位置). 本文考虑了  $N_g = 8$  和 24 的情况, 势能曲面示意图如图 2 所示.

采用沿  $x$  轴方向线偏光  $E(t) = E_0 \sin(\omega_0 t) f(t)$ ,  $E_0$  和  $\omega_0$  分别表示激光脉冲电场的振幅和角频率,  $f(t)$  为激光包络. 计算中采用 10 个周期的激光脉冲, 激光电场强度在脉冲的前 3 个周期线性上升, 后 7 个周期保持不变, 用谱方法求解含时薛定谔方程<sup>[44]</sup>, 得到沿激光场极化方向高次谐波:

$$F(\omega) = \int \langle \psi(x, y, t) | e_x \nabla V | \psi(x, y, t) \rangle e^{i\omega t} dt. \quad (4)$$

其中  $\omega$  表示释放光子的频率,  $e_x$  表示沿  $x$  轴方向的单位矢量.

### 2.2 电子运动的经典动力学过程

强激光场与团簇相互作用产生高次谐波会经历很多复杂的过程, 为了更加明晰、通俗地展示强激光场与团簇相互作用产生高次谐波的过程, 本文在 Corkum<sup>[13]</sup> 三步模型的基础上, 同样将其简化为 3 个阶段: 内电离、电子经典运动、复合. 第 1 阶段, 内电离, 即电子在外场作用下从母核电离出去;

第 2 阶段, 电子经典运动, 即电子在外场及团簇库仑场的作用下做经典运动; 第 3 阶段, 复合, 即电子与母核复合并释放高次谐波. 不同的是, 在考虑电子的经典运动时, 本文考虑了团簇离子形成的库仑场对电子的作用. 当内电离发生后, 电子被当作经典粒子, 其运动满足经典牛顿运动方程:

$$a(t) = \frac{d^2x}{dt^2} = -E_0 \sin(\omega_0 t) - \nabla V(r), \quad (5)$$

式中  $a(t)$  表示电子加速度,  $V(r)$  表示团簇的库仑势, 表示形式与 (3) 式相同. 电子发生内电离后所获得能量为

$$E = \frac{v^2}{2} + V(r). \quad (6)$$

其中  $v$  表示电子速度.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 强激光场与氢团簇相互作用产生高次谐波

首先利用强度  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ 、波长  $\lambda = 1200 \text{ nm}$  和  $I = 5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1400 \text{ nm}$  的线偏振激光与 H 原子、 $\text{H}^{8+}$  及  $\text{H}^{24+}$  团簇 (离子间距  $R = 5 \text{ a.u.}$ ) 相互作用, 产生的高次谐波如图 3(a) 和图 3(b) 所示. 由图 3 可以看到, 与 H 原子相比, 强激光场与  $\text{H}^{8+}$  和  $\text{H}^{24+}$  团簇相互作用产生的谐波平台延展到更高的截止位置. 图 3(a) 中,  $\text{H}^{8+}$  团簇产生的高次谐波平台相对于 H 原子拓宽了 47 阶次,  $\text{H}^{24+}$  团簇产生的高次谐波平台相对于 H 原子

拓宽了 87 阶次. 图 3(b) 中,  $\text{H}^{8+}$  团簇产生的高次谐波平台相对于 H 原子拓宽了 56 阶次,  $\text{H}^{24+}$  团簇产生的高次谐波平台相对于 H 原子拓宽了 108 阶次.

#### 3.2 电子经典动力学行为

本节利用  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$  的线偏振激光与  $\text{H}^{8+}$  团簇和  $I = 5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1400 \text{ nm}$  的线偏振激光与  $\text{H}^{24+}$  团簇相互作用, 从经典动力学角度考察电子的动力学行为, 从而试图解释 3.1 节中团簇谐波平台出现拓宽的原因.

图 4 展示了  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$  的线偏振激光与  $\text{H}^{8+}$  团簇相互作用及  $I = 5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1400 \text{ nm}$  的线偏振激光与  $\text{H}^{24+}$  团簇相互作用时电子的动力学行为. 图 4(a) 为  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$  的线偏振激光与  $\text{H}^{8+}$  团簇相互作用时电子返回时间与返回动能及总能量的关系, 可以看出, 对于  $\text{H}^{8+}$  团簇, 电子的最大返回动能可达激光基频的 184 倍左右. 图 4(b) 为  $I = 5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1400 \text{ nm}$  的线偏振激光与  $\text{H}^{24+}$  团簇相互作用时电子返回时间与返回动能及总能量的关系, 对于  $\text{H}^{24+}$  团簇, 电子的最大返回动能可达激光基频的 471 倍左右. 随后考察返回动能最大的情况下电子的动力学行为, 图 4(c) 和图 4(d) 展示了电子的动能、势能及总能量随时间变化情况, 图 4(e) 和图 4(f) 表示电子在  $X$  轴方向上的位移随时间的变化. 通过观察图 4(c)、图 4(e) 与图 4(d)、图 4(f) 发现, 在两种情况下电子的能量变化都具有相同的趋势, 即在电子返回过程中, 电子的动能及总能量逐步增大, 势能逐步减小, 电子势能逐步转

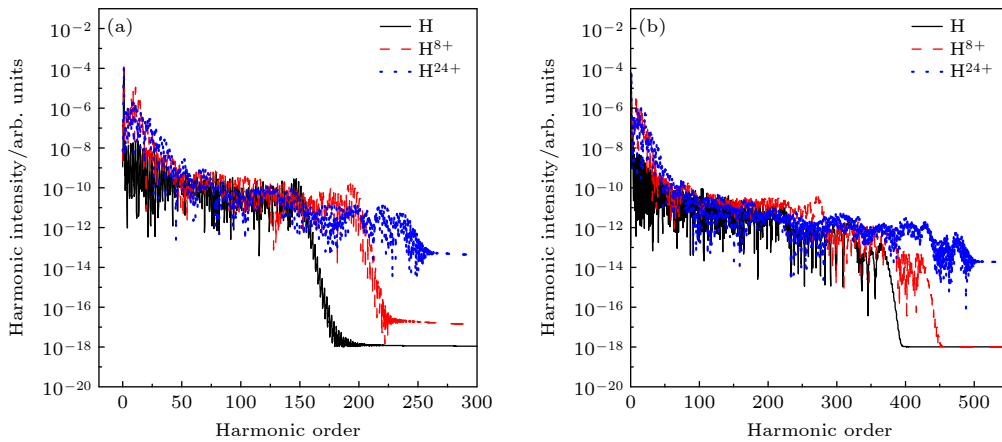


图 3 强激光场与 H 原子和 H 团簇相互作用产生的高次谐波 (谐波阶表示谐波发射频率  $\omega$  与激光基频  $\omega_0$  的比值) (a)  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$ ; (b)  $I = 5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1400 \text{ nm}$

Fig. 3. High order harmonic generated from the interaction between intense laser field and H atom/H cluster: (a)  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$ ; (b)  $I = 5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1400 \text{ nm}$ .

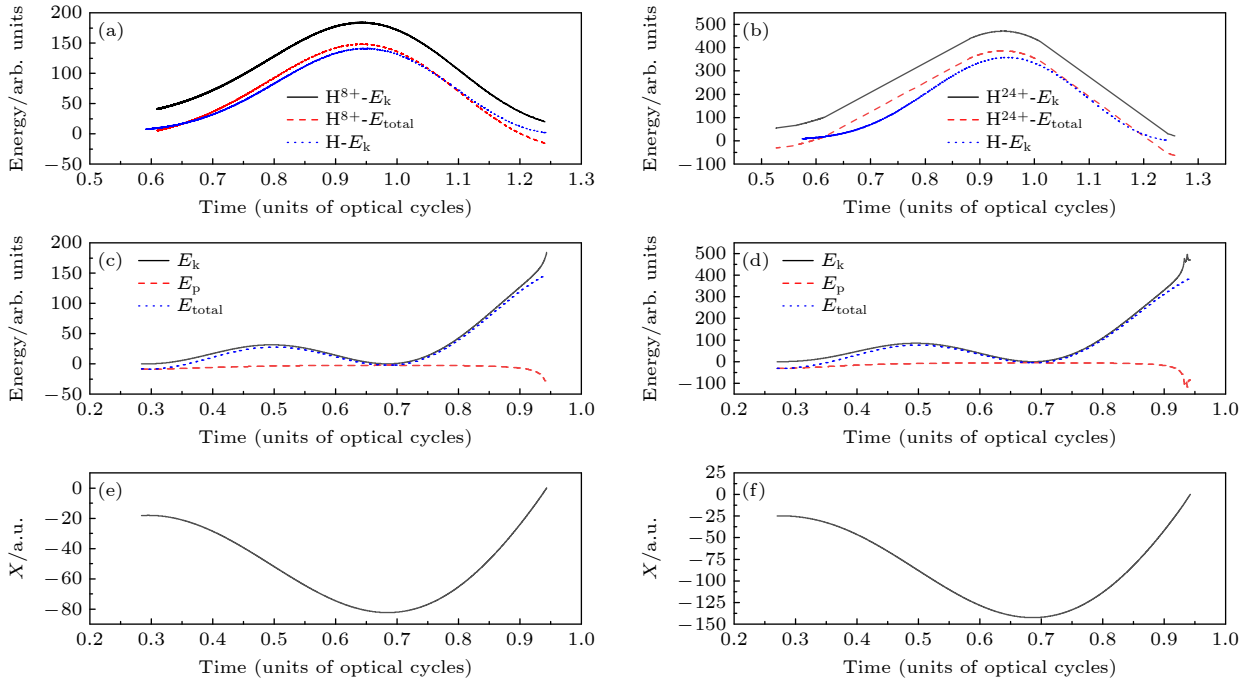


图 4 (a), (c), (e)  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$  的线偏振激光与  $\text{H}^{8+}$  团簇相互作用时的电子动力学行为; (b), (d), (f)  $I = 5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1400 \text{ nm}$  的线偏振激光与  $\text{H}^{24+}$  团簇相互作用时的电子动力学行为. (a), (b) 电子返回时间与返回能量的关系, 其中黑色实线表示动能、红色划线表示总能量、蓝色点线表示相应参数激光场与 H 原子相互作用时电子的返回动能与返回时间的关系; (c), (d) 电子的动能、势能及总能量随时间的变化, 其中黑色实线表示动能、红色划线表示势能、蓝色点线表示总能量; (e), (f) 电子在 X 轴方向上位移随时间的变化

Fig. 4. Electron dynamic behavior of linearly polarized laser interacting with cluster: (a), (c), (e) For  $\text{H}^{8+}$  cluster illuminated by the laser with  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$ ; (b), (d), (f) for  $\text{H}^{24+}$  cluster illuminated by the laser with  $I = 5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1400 \text{ nm}$ . (a), (b) The relation between the return time and the return energy of the electron, where the black solid line represents the kinetic energy, the red dash line represents the total energy, and the blue dot line represents the kinetic energy from H atom; (c), (d) the energy change over time, where the black solid line represents kinetic energy, the red dash line represents potential energy, and the blue dot line represents total energy; (e), (f) displacement variations with time along X direction.

化为电子动能. 这一过程与 Saalman 和 Rost<sup>[45]</sup> 在研究原子团簇与强激光相互作用时指出的当发生外电离 (即电子在外场作用下离开团簇的过程) 的电子再次返回团簇时会因为势能降低而获得额外的动能的结论一致. 同时, 图 4(a) 和图 4(b) 中的蓝色点线表示相应参数的线偏振激光与 H 原子相互作用时电子的返回动能与返回时间的关系, 可以看出, H 团簇与 H 原子中电子最大返回动能的差值接近团簇中除母核外其他离子在母核处产生的库仑势. 因而本文指出, 团簇能拓展高次谐波平台的主要原因在于母核周围其他离子对电子的库仑作用. 对比图 4(c) 和图 4(d) 发现, 对于  $\text{H}^{24+}$  团簇, 电子在即将与母体离子复合时, 电子的能量出现了振荡. 将该过程进行放大, 其动力学过程如图 5 所示, 发现两个动能极大值点, 分别对应了两个势能极小值点, 同时分别对应电子在 X 轴上的位移  $-9.9826 \text{ a.u.}$ ,  $-5.02286 \text{ a.u.}$ , 即电子在返回过程中, 经过了 X 轴负半轴母核外第 2 层、第 1 层某

个离子附近, 电子与离子相当靠近而导致势能降低, 从而导致电子的能量出现了振荡.

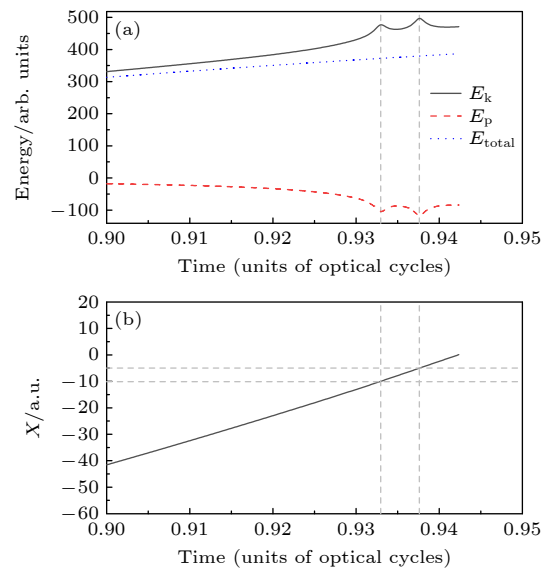


图 5 图 4(d) 和图 4(f) 的部分放大图  
Fig. 5. Partial enlargement of Fig. 4(d) and Fig. 4(f).

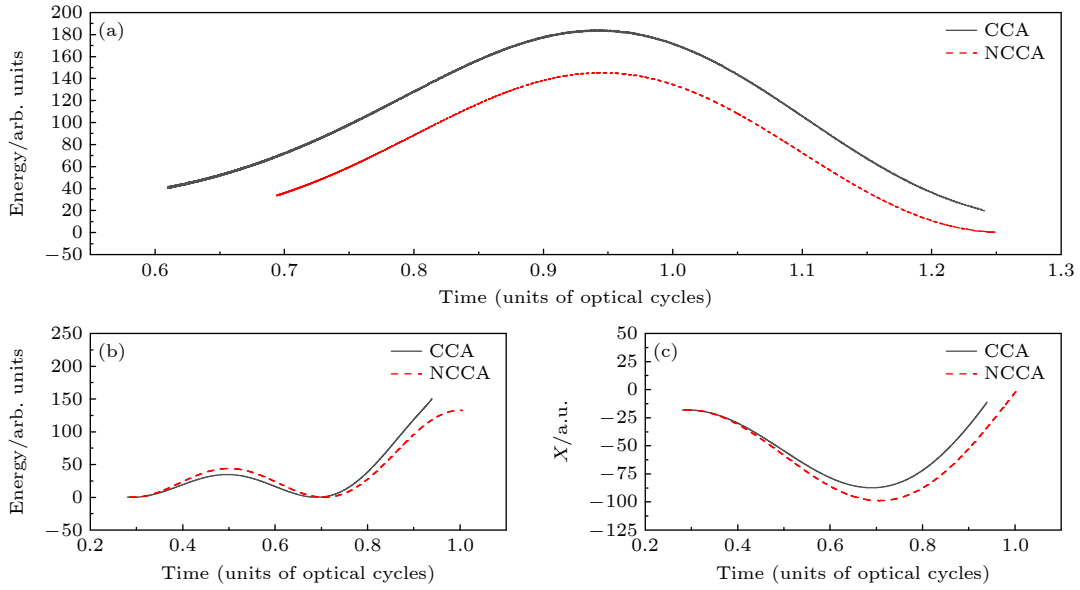


图 6  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$  的线偏振激光与  $\text{H}^{8+}$  团簇相互作用过程中考虑 (CCA) 和不考虑库仑势 (NCCA) 影响的情况下电子的动力学行为 (a) 电子返回时间与返回动能的关系; (b) 电子的动能随时间变化情况; (c) 电子在  $X$  轴方向上位移随时间的变化

Fig. 6. Dynamical behavior of the electron with and without the influence of the Coulomb potential for  $\text{H}^{8+}$  cluster illuminated by the laser with  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$ : (a) The relationship between electron return time and return kinetic energy; (b) the variation of the kinetic energy of electrons over time; (c) the displacement of electrons in the  $X$ -axis direction over time.

图 6 展示了  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$  的线偏振激光与  $\text{H}^{8+}$  团簇相互作用过程中考虑和不考虑库仑势影响的情况下电子的动力学行为. 其中图 6(a) 表示电子返回时间与返回动能的关系, 在考虑库仑作用的情况下电子的返回动能要比不考虑库仑作用的情况高, 在不考虑库仑作用的情况下, 电子的最大动能为激光基频的 145 倍. 图 6(b) 和图 6(c) 分别表示电离时间 (考虑库仑作用时返回动能最大的情况下电子的电离时间) 相同的情况下电子的动能随时间的变化, 以及在  $X$  轴方向上位移随时间的变化情况. 发现电子返回与离子复合的时间不同, 不考虑库仑作用时电子的返回时间要晚于考虑库仑作用时的情况, 同时不考虑库仑作用时电子返回时的动能小于考虑库仑作用时的情况. 这是由于在考虑库仑场作用时, 电子在返回过程中受到了离子的库仑力作用, 电子受到离子的库仑力在  $X$  轴上的分量及激光电场的的作用同向, 从而导致加速度更大, 复合前电子的速度更大, 动能更高.

将通过 TDSE 计算得到的高次谐波的时频分布图与考虑库仑作用时通过经典计算得到的返回动能与单个原子的电离能之和与返回时间关系进行比较, 其结果如图 7 所示. 图中彩色图案表示高次谐波的时频分布图, 黑色实线表示考虑库仑作用时通过经典计算得到的返回动能与单个原子的电

离能之和与返回时间关系. 其中图 7(a) 表示  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$  的线偏振激光与  $\text{H}^{8+}$  团簇相互作用的情况, 图 7(b) 表示  $I = 5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1400 \text{ nm}$  的线偏振激光与  $\text{H}^{24+}$  团簇相互作用的情况. 若不考虑库仑作用, 其结果如图 7 中红色划线所示, 电子的最大返回动能要远小于 TDSE 计算结果. 通过对比发现, 考虑库仑作用的经典分析结果能与 TDSE 结果很好的对应.

### 3.3 团簇高次谐波平台拓展

在 3.1 节中, 当利用强度和波长分别为  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$  的线偏振光时, 与  $\text{H}$  原子相比,  $\text{H}^{8+}$  团簇产生的高次谐波平台拓宽了 47 阶次,  $\text{H}^{24+}$  团簇产生的高次谐波平台拓宽了 87 阶次. 当利用  $I = 5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1400 \text{ nm}$  的线偏振光时,  $\text{H}^{8+}$  团簇产生的高次谐波平台相对于  $\text{H}$  原子拓宽了 56 阶次,  $\text{H}^{24+}$  团簇产生的高次谐波平台相对于  $\text{H}$  原子拓宽了 108 阶次. 相应的数值近似等于母核周围其他离子在母核处产生的库仑势, 与 3.2 节给出的结论一致.

本节考察了离子间距对高次谐波截止能量的影响, 图 8 展示了  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$  的线偏振激光与离子间距不同的  $\text{H}^{8+}$  团簇相互作用时产生的高次谐波. 由图 8 发现, 当增大离子间

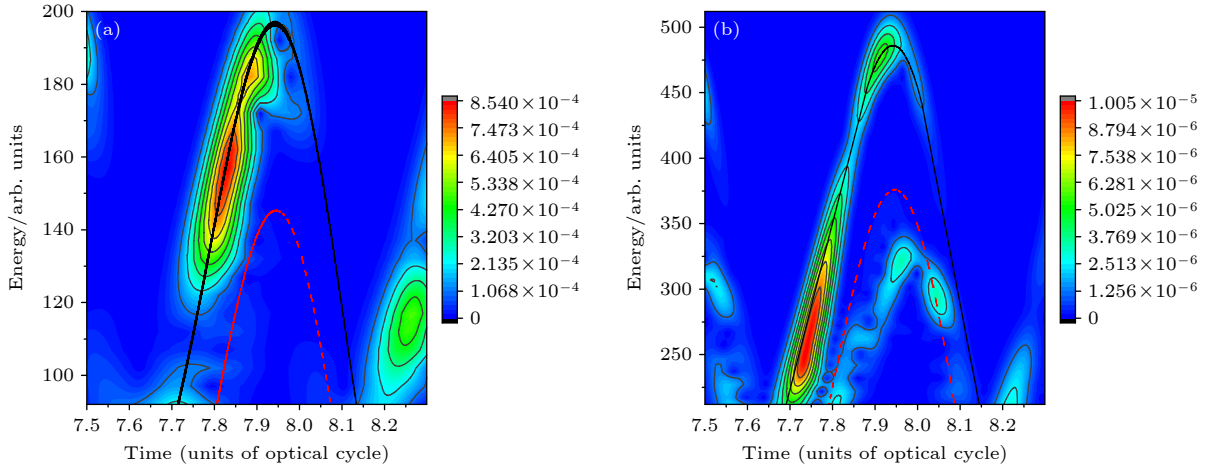


图 7 通过 TDSE 计算得到的高次谐波时频分布图 (图中黑色实线表示考虑库仑作用时通过经典计算得到的返回动能与单个原子的电离能之和与返回时间的关系, 红色划线表示不考虑库仑作用时电子返回时间与返回动能的关系) (a)  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$  的线偏振激光与  $\text{H}^{8+}$  团簇相互作用; (b)  $I = 5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1400 \text{ nm}$  的线偏振激光与  $\text{H}^{24+}$  团簇相互作用

Fig. 7. Time-frequency distribution of higher harmonics calculated by TDSE: (a)  $\text{H}^{8+}$  cluster illuminated by the laser with  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$ ; (b)  $\text{H}^{24+}$  cluster illuminated by the laser with  $I = 5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1400 \text{ nm}$ . The black solid line represents the relationship between the sum of the ionization energy of a single atom and return kinetic energy obtained by classical calculation and the return time in the case of considering Coulomb effect, while the red dash line represents the relation between the return time and the return energy of the electron in the case of no considering Coulomb effect.

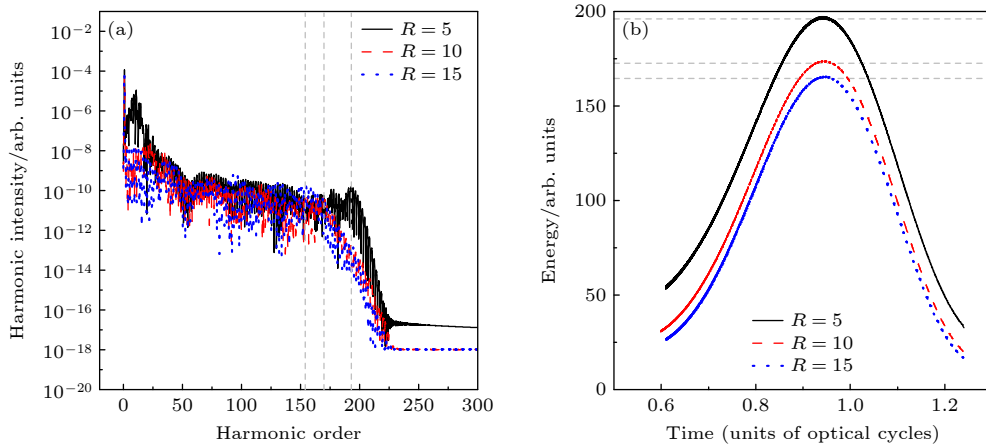


图 8 (a)  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$  的线偏振激光与离子间距不同的  $\text{H}^{8+}$  团簇相互作用时产生的高次谐波; (b) 通过经典计算得到的返回动能与单个原子的电离能之和与返回时间的关系

Fig. 8. (a) High-order harmonics generate from the interaction between the linearly polarized laser and  $\text{H}^{8+}$  cluster with different ion spacing, where  $I = 3 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ ,  $\lambda = 1200 \text{ nm}$ ; (b) the relationship between the sum of the ionization energy of a single atom and return kinetic energy obtained by classical calculation and the return time.

距时, 谐波的截止阶次及电子的最大返回动能随之减小. 这主要是由于离子间距增大, 周围离子在母核处产生的库仑势减小, 谐波截止能量对离子间距变化给出了灵敏响应, 为观测团簇膨胀提供了一种可能途径.

#### 4 结 论

本文首先通过数值求解强激光场与二维模型

$\text{H}$  离子团簇相互作用的含时薛定谔方程, 发现强激光场与  $\text{H}$  离子团簇相互作用能有效地拓展谐波平台. 接着将强激光场与团簇相互作用分解成 3 个过程, 即内电离、在外场及团簇库仑场作用下的经典运动、复合. 当团簇发生内电离后, 即被视为经典粒子, 其运动满足牛顿运动方程. 通过跟踪电子的经典轨迹及动能和势能随时间的变化情况, 发现在电子返回与母核复合的过程中电子会因为势能降低而获得额外的动能, 同时通过经典模型计算的返

回动能与返回时间的关系能与 TDSE 结果能很好地相符. 另将团簇与单个原子产生的高次谐波截止能量及电子的最大返回动能进行了对比, 发现团簇能拓展高次谐波平台的主要原因在于母核周围其他离子对电子的库仑作用, 同时考察了离子间距对高次谐波截止能量的影响, 并提出建立一种可能的高次谐波截止能量维度与团簇膨胀的关联.

## 参考文献

- [1] Itatani J, Levesque J, Zeidler D, Niikura H, Pépin H, Kieffer J C, Corkum P B, Villeneuve D M 2004 *Nature* **432** 867
- [2] Zhu X S, Zhang Q B, Lan P F, Lu P X 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 224207 (in Chinese) [祝晓松, 张庆斌, 兰鹏飞, 陆培祥 2016 *物理学报* **65** 224207]
- [3] Yu S J, Li W Y, Li Y P, Chen Y J 2017 *Phys. Rev. A* **96** 013432
- [4] Su N, Yu S J, Li W Y, Yang S P, Chen Y J 2018 *Chin. Phys. B* **27** 054213
- [5] Qiao Y, Huo Y Q, Liang H Q, Chen J G, Liu W J, Yang Y J, Jiang S C 2022 *Opt. Express* **30** 9971
- [6] Qiao Y, Huo Y Q, Jiang S C, Yang Y J, Chen J G 2023 *Phys. Rev. B* **107** 075201
- [7] Tao C Y, Lei J T, Yu X, Luo Y, Ma X W, Zhang S F 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 053202 (in Chinese) [陶琛玉, 雷建廷, 余璇, 骆炎, 马新文, 张少锋 2023 *物理学报* **72** 053202]
- [8] Papadogiannis N A, Witzel B, Kalpouzos C, Charalambidis D 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 4289
- [9] Hentschel M, Kienberger R, Spielmann C, Reider G A, Milosevic N, Brabec T, Corkum P, Heinzmann U, Drescher M, Krausz F 2001 *Nature* **414** 509
- [10] Goulielmakis E, Uiberacker M, Kienberger R, Baltuska A, Yakovlev V, Scrinzi A, Westerwalbesloh T, Kleineberg U, Heinzmann U, Drescher M, Krausz F 2004 *Science* **305** 1267
- [11] Sandberg R L, Paul A, Raymondson D A, Haedrich S, Gaudiosi D M, Holtsnider J, Tobey R I, Cohen O, Murnane M M, Kapteyn H C, Song C, Miao J, Liu Y, Salmassi F 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 098103
- [12] Iii C D, Rundquist A R, Murnane M M, Kapteyn H C 1998 *Science* **280** 1412
- [13] Corkum P B 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 1994
- [14] Yang Y J, Chen G, Chen J G, Zhu Q R 2004 *Chin. Phys. Lett.* **21** 652
- [15] Yang Y J, Chen J G, Chi F P, Zhu Q R, Zhang H X, Sun J Z 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 1537
- [16] Cheng C Z, Zhou X X, Li P C 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 202 (in Chinese) [成春芝, 周效信, 李鹏程 2011 *物理学报* **60** 202]
- [17] Artemyev A N, Cederbaum L S, Demekhin P V 2017 *Phys. Rev. A* **95** 033402
- [18] Liu Y, Guo F M, Yang Y J 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 173202 (in Chinese) [刘艳, 郭福明, 杨玉军 2019 *物理学报* **68** 173202]
- [19] Zhou X, Lock R, Wagner N, Li W, Kapteyn H C, Murnane M M 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 073902
- [20] Yu S J, Liu Z Q, Li Y P 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 043101 (in Chinese) [于术娟, 刘竹琴, 李雁鹏 2023 *物理学报* **72** 043101]
- [21] Ghimire S, Ndabashimiye G, DiChiara A D, Sistrunk E, Stockman M I, Agostini P, DiMauro L F, Reis D A 2014 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47** 204030
- [22] Vampa G, McDonald C R, Orlando G, Corkum P B, Brabec T 2015 *Phys. Rev. B* **91** 064302
- [23] Kruchinin S Yu, Krausz F, Yakovlev V S 2018 *Rev. Mod. Phys.* **90** 021002
- [24] Li L, Zhang Y F, Lan P F, Huang T F, Zhu X S, Zhai C Y, Yang K, He L X, Zhang Q B, Cao W, Lu P X 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 187401
- [25] Qiao Y, Chen J Q, Huo Y Q, Liang H Q, Yu R X, Chen J G, Liu W J, Jiang S C, Yang Y J 2023 *Phys. Rev. A* **107** 023523
- [26] Véliard V, Taïeb R, Maquet A 1999 *Phys. Rev. A* **60** 3952
- [27] Vozzi C, Nisoli M, Caumes J P, Sansone G, Stagira S, Silvestri S D 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 111121
- [28] Hu S X, Xu Z Z 1997 *Appl. Phys. Lett.* **71** 2605
- [29] Tisch J W G, Ditmire T, Fraser D J, Hay N, Mason M B, Springate E, Marangos J P, Hutchinson M H R 1997 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** L709
- [30] Aladi M, Márton I, Rácz P, Dombi P, Földes I B 2014 *High Power Laser Sci. Eng.* **2** E32
- [31] Donnelly T D, Ditmire T, Neumann K, Perry M D, Falcone R W 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 2472
- [32] Feng L, Liu H 2015 *Phys. Plasmas* **22** 013107
- [33] Numico R, Giulietti D, Giulietti A, Gizzi L A, Roso L 2000 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** 2605
- [34] Vázquez de Aldana J R, Roso L 2001 *J. Opt. Soc. Am. B* **18** 325
- [35] Park H, Wang Z, Xiong H, Schoun S B, Xu J, Agostini P, DiMauro L F 2014 *Phys. Rev. Lett.* **113** 263401
- [36] Tao Y, Hagmeijer R, Bastiaens H M J, Goh S J, van der Slot P J M, Biedron S G, Milton S V, Boller K J 2017 *New J. Phys.* **19** 083017
- [37] Ruf H, Handschin C, Cireasa R, Thiré N, Ferré A, Petit S, Descamps D, Mével E, Constant E, Blanchet V, Fabre B, Mairesse Y 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 083902
- [38] Moreno P, Plaja L, Roso L 1994 *Europhys. Lett.* **28** 629
- [39] Zaretsky D F, Korneev P, Becker W 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 105402
- [40] Bodi B, Aladi M, Racz P, Földes I B, Dombi P 2019 *Opt. Express* **27** 26721
- [41] Véliard V, Taïeb R, Maquet A 2001 *Phys. Rev. A* **65** 013202
- [42] Li N N, Zhai Z, Liu X S 2008 *Chin. Phys. Lett.* **25** 2508
- [43] Strelkov V, Saalman U, Becker A, Rost J M 2011 *Phys. Rev. Lett.* **107** 113901
- [44] Feit M D, Jr Fleck J A, Steiger A 1982 *J. Comput. Phys.* **47** 412
- [45] Saalman U, Rost J M 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 133006

# High-order harmonic platform extension and cluster expansion of H ion cluster

Zhang Chun-Yan <sup>1)2)†</sup>

1) (*College of Physics and Information Technology, Shaanxi Normal University, Xi'an 710119, China*)

2) (*School of Intelligence Science and Engineering, Hubei Minzu University, Enshi 445000, China*)

( Received 5 April 2023; revised manuscript received 15 August 2023 )

## Abstract

By solving the time-dependent Schrödinger equation for the interaction of the intense laser field with the two-dimensional model of H ion cluster, it is found that the high-order harmonic plateau produced by H ion cluster is wider than that generated by a single H atom. The interaction between intense laser field and cluster is decomposed into three processes: internal ionization, classical motion under the action of external field and Coulomb field of the cluster ions, and recombination. After internal ionization, the particle is deemed classical and its motion follows Newton's equation of motion. By studying the classical trajectory of electron and the variation of kinetic and potential energy with time, it is observed that during the electron's returning, the additional kinetic energy is required as a result of the reduction in potential energy. Furthermore, the correlation between return energy and return time obtained from the classical model is in good agreement with that obtained from time-dependent Schrödinger equation. In this study, the cutoff energy of high-order harmonic generated by clusters is compared with that of a single atom, indicating that the extension of the platform of high-order harmonic by clusters is primarily caused by the Coulomb effect of other ions surrounding the parent nucleus. Additionally, the influence of ion spacing on the cutoff energy of high-order harmonic is also investigated, and a possible relationship between the cut-off energy of high harmonic and the cluster expansion is established.

**Keywords:** high-order harmonic, cluster, Coulomb potential, expansion

**PACS:** 42.65.Ky, 36.40.Vz, 41.75.Jv

**DOI:** [10.7498/aps.72.20230534](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230534)

---

† Corresponding author. E-mail: [2012004@hbmzu.edu.cn](mailto:2012004@hbmzu.edu.cn)



## H离子团簇高次谐波平台展宽与团簇膨胀

张春艳

### High-order harmonic platform extension and cluster expansion of H ion cluster

Zhang Chun-Yan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 214203 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230534

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230534>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

### 您可能感兴趣的其他文章

#### Articles you may be interested in

极性分子CO高次谐波产生过程中的不对称性

Asymmetry in high-order harmonic generation of polar molecule CO

物理学报. 2022, 71(23): 234204 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221714>

快凝Pd<sub>82</sub>Si<sub>18</sub>合金原子团簇的演化特性及遗传机制

Evolution characteristics and hereditary mechanisms of clusters in rapidly solidified Pd<sub>82</sub>Si<sub>18</sub> alloy

物理学报. 2020, 69(4): 046401 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20190970>

强激光等离子体相互作用驱动高次谐波与阿秒辐射研究进展

Research progress of high-order harmonics and attosecond radiation driven by interaction between intense lasers and plasma

物理学报. 2021, 70(8): 084206 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210339>

准直的O<sub>2</sub>分子高次谐波谱中的干涉效应

Interference effect in high order harmonic generation by aligned O<sub>2</sub>

物理学报. 2021, 70(20): 204206 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210433>

优化组合激光场驱动原子产生高次谐波及单个超短阿秒脉冲理论研究

Theoretical study of high-order harmonics and single ultrashort attosecond pulse generated by optimized combination of laser field

物理学报. 2022, 71(23): 233204 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221298>

基于高次谐波产生的极紫外偏振涡旋光

Extreme ultraviolet polarization vortex beam based on high harmonic generation

物理学报. 2020, 69(4): 044203 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20190834>