

强激光场中长程势与短程势原子产生 高次谐波与电离特性研究^{*}

李鹏程 周效信[†] 董晨钟 赵松峰

(西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

(2003 年 4 月 25 日收到, 2003 年 6 月 23 日收到修改稿)

用数值方法求解含时薛定谔方程, 研究了具有长程势和短程势的一维原子在强激光场中的高次谐波和电离特性. 在强激光场中, 长程势和短程势原子产生的高次谐波具有相似的特性, 对应的平台和截止位置相同, 但是短程势原子没有低阶的高次谐波, 而长程势和短程势原子在激光场中的电离概率明显不同. 研究结果表明, 原子的激发态结构对低阶的高次谐波和原子的电离概率有重要影响.

关键词: 强激光场, 高次谐波, 电离概率

PACC: 3280, 4250

1. 引 言

近年来, 由于强激光、超强激光技术的飞速发展, 尤其是飞秒激光技术的发展^[1], 聚焦后激光的电场分量已达到甚至超过了原子内部的库仑场, 为研究强激光场以及超强激光场中原子的特性提供了强有力的手段. 目前, 原子在强激光场中所发生的一些非线性多光子现象, 诸如高次谐波 (HHG) 的产生、阈上电离 (ATI) 电离概率等引起了学者的极大兴趣^[2-5].

已有的理论和实验研究表明, 原子在强激光场中产生的高次谐波具有典型的特征: 随谐波阶次的增加, 开始几阶谐波强度很快地下降, 紧接着出现了一个所谓的“平台”, 在平台区域内, 谐波的强度随谐波阶次的增加变化很小, 在平台区域末端的某一阶次谐波附近, 谐波强度迅速下降, 出现截止. 这一截止位置的阶数满足经验公式 $N_{\max} = (I_{\text{at}} + 3.17 U_p) / \omega$ (I_{at} 为原子的电离能, ω 为激光的频率, U_p 为电子在激光场中的有质动力能). Corkum^[6] 半经典的隧道电离模型成功地解释了实验给出的这个经验公式. 按照隧道电离模型, 原子在强激光场的作用下发生隧道电离, 进入连续态的准自由电子会在随外

场的振荡, 获得额外的能量 (震动动能), 当它再次回到原子核附近复合到基态时, 辐射出一个光子, 光子的最大能量等于原子的电离能加上电子从激光场中获得的能量 $3.17 U_p$. 同时, 隧道电离模型也可以解释原子的电离过程, 由隧道电离进入连续态的准自由电子在激光场中被加速, 当它再次回到原子核附近时被原子核散射而电离. 不过这种半经典模型并没有说明原子的激发态对高次谐波和电离概率的影响. 另一方面, 按照多光子吸收理论, 如果多光子电离过程是单步过程, 则只要原子的基态能量相同, 在相同的激光强度和激光频率下, 原子吸收相同数目光子的概率相同, 电离概率也相同. 最近, Faria 等人^[7] 研究了一维原子在强激光场中产生的高次谐波和电离概率的特点. 该文通过可调参数来控制势的范围, 使原子基态能量保持不变, 而激发态的数量随原子势范围的减小而减小. 结果发现, 一维原子的长程势和短程势对产生的高次谐波影响较小, 而对原子电离概率却影响很大, 对此, 文献 [7] 并没有给出进一步的解释. 本文将利用分裂算符方法数值求解含时薛定谔方程, 研究具有长程势和短程势的一维原子在基态能量相同时, 在强激光场中产生高次谐波的特点和不同势范围对原子电离概率的影响.

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 10274063), 国家教育部科技研究重点项目 (批准号: 03126) 及中国科学院武汉物理与数学研究所波谱与原子分子物理国家重点实验室 (批准号: T152111) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: zhoux@nwnu.edu.cn

2. 理论方法

在偶极近似和长度规范下, 一维原子在激光场中的行为由含时薛定谔方程描述(原子单位)

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

式中 $H(x, t)$ 为体系的哈密顿量:

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

式中 $E(t)$ 为激光场的电场分量, $V(x)$ 分别采用如下—维势形式:

$$\text{长程势}^{[81]} \quad V(x) = -\left[a^2 \exp\left[-\left(\frac{x}{a}\right)^2\right] + x^2 \right]^{-\frac{1}{2}}, \quad (3)$$

$$\text{短程势}^{[91]} \quad V(x) = -b \exp\left(-\frac{x^2}{c}\right), \quad (4)$$

式中 $a = 1.60$, $b = 0.986$, $c = 1.202$, 这些参数的选取是保证这两个势给出的原子基态能级有相同的值.

(1) 式中的解可表示为

$$\psi(t + \Delta t) = \exp(-iH\Delta t) \psi(x, t). \quad (5)$$

用分裂算符方法^[10]对(5)式指数算符进行劈裂, 得

$$\begin{aligned} \psi(x, t + \Delta t) &= \exp\left(\frac{i\Delta t}{4} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \\ &\times \exp\{-i\Delta t [V(x) - xE(t)]\} \\ &\times \exp\left(\frac{i\Delta t}{4} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \psi(x, t) + O(\Delta t^3). \end{aligned} \quad (6)$$

由(6)式可以看出, 从时间 t 到 $t + \Delta t$ 的电子波函数可以通过三步过程得到. 首先, 通过快速傅里叶变换将 t 时刻的波函数变换到动量空间, 由

$$\psi_1(p, t) = \exp\left(-\frac{i\Delta t}{4} p^2\right) \psi(x, t) \quad (7)$$

得到函数 $\psi_1(p, t)$, 接着通过快速傅里叶逆变换把函数 $\psi_1(p, t)$ 变换到坐标空间, 由

$$\psi_2(x, t) = \exp\{-i\Delta t [V(x) - xE(t)]\} \psi_1(x, t) \quad (8)$$

得到函数 $\psi_2(x, t)$, 然后, 函数 $\psi_2(x, t)$ 再次被变换到动量空间, 通过下式得到 $t + \Delta t$ 时刻的动量波函数 $\psi(p, t + \Delta t)$:

$$\psi(p, t + \Delta t) = \exp\left(-\frac{i\Delta t}{4} p^2\right) \psi_2(p, t). \quad (9)$$

最后将其重新变换回到坐标空间, 这样不断重复(6)式的演化过程, 直到得到激光脉冲结束时的波函数.

因为高次谐波的强度与电子平均加速度的傅里叶变换模的平方成正比, 运用 Ehrenfest 定理, 电子的平均加速度为

$$\begin{aligned} a(t) &= \psi(x, t) \left| -\frac{d^2}{dt^2} \right| \psi(x, t) \\ &= \psi(x, t) \left| \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right| \psi(x, t), \end{aligned} \quad (10)$$

由此, 高次谐波谱的强度可表示为

$$P(\omega) = |a(\omega)|^2, \quad (11)$$

式中

$$a(\omega) = \int_0^t a(t) \exp(-i\omega t) dt. \quad (12)$$

激光脉冲结束时, 电子处在束缚态的概率为

$$P(\tau) = \sum_{\text{束缚}} |\varphi_n(x)| \psi(x, t)|^2, \quad (13)$$

式中 τ 为激光脉冲结束时的时间, 求和仅对所有束缚态进行. 由此得到电离概率为

$$P_{\text{ion}}(\tau) = 1 - P(\tau). \quad (14)$$

3. 计算结果与讨论

在求解(1)式的含时薛定谔方程时, 首先要给出初始条件并确定初始波函数. 考虑到从 $t = 0$ 时刻激光场开始作用到原子上, 因此原子在初始时刻处于无外场的基态, 其初始波函数为基态波函数. 对于(3)和(4)式的势函数, 原子的基态及其激发态波函数没有解析解, 其值只能以数值形式给出. 在无外场作用下, 一维原子的本征值方程为

$$H_0 \phi_n(x) = E_n \phi_n(x), \quad (15)$$

式中 $H_0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$, E_n 为体系的本征值, $\phi_n(x)$ 为与 E_n 对应的本征函数. 在求解(15)式的本征值和本征函数时, 我们用对角化方法进行求解. 为此将 $\phi_n(x)$ 用 7 阶, 38 个 B 样条函数展开, 其展开系数和对应的本征能量都可以通过对角化方法确定. 表 1 列出由(3)和(4)式的势函数得到的最低几个本征能量的值. 由此可见(4)式的短程势仅有一个束缚态能级——基态, 没有激发态.

计算中所使用的激光场的电场分量为

$$E(t) = \begin{cases} E_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{6T}\right) \sin \omega t & (0 \leq t \leq 3T), \\ E_0 \sin \omega t & (3T \leq t \leq 16T), \end{cases} \quad (16)$$

式中 E_0 , ω , T 分别为电场的振幅、角频率和周期.

表 1 一维长程势和短程势原子的束缚态能级 (单位 a. u.)

n	长程势	短程势
	ϵ_n	ϵ_n
0	-0.50027	-0.49998
1	-0.26700	
2	-0.14069	
3	-0.09053	
4	0.06036	

为了研究原子在强激光场中处于隧道电离区域所产生的高次谐波和电离特性,所采用的参数需要满足 Keldysh^[11]判据 $\gamma < 1$, 其中 $\gamma = \sqrt{2\omega^2 I_{at}/I_1}$ (I_{at} 为原子的电离势, I_1 为激光的光强). 由于一维长程势和短程势原子所具有的电离能为 0.5 a. u., 所以我们所使用的电场参数为 $\omega = 0.0502$ a. u. (相当于 10 个光子电离), $E_0 = 0.06$ a. u. (1.26×10^{14} W/cm²), 空间区域为 $|x_{max}| \leq 200$ a. u. 为了防止到达边界附近的波函数在其边界上发生反射,在边界附近使用了吸收函数

$$f(x) = [1 + \exp(1.25x \pm x_{max})]^{-1} \quad (-x_{max} \leq x \leq x_{max}). \quad (17)$$

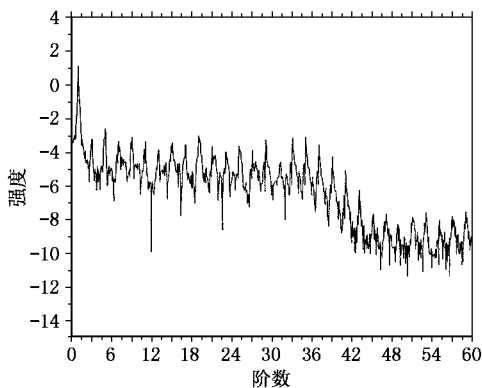


图 1 长程势原子产生的高次谐波 $E = 0.06$ a. u., $\omega = 0.0502$ a. u., $\mu = 16T$

图 1 和图 2 分别给出一维原子在(3)式的长程势和(4)式的短程势情况下产生的高次谐波. 由图可以看出,它们的主要差别在低阶的高次谐波. 对于长程势原子,没有缺阶现象,而对于短程势原子,则出现缺阶现象,即第 3 阶和第 5 阶高次谐波消失. 已有的研究结果表明^[12],低能的高次谐波的贡献主要是由束缚态-束缚态之间的相互作用产生的,并且随阶数的增加而衰减;对于平台区域,高次谐波主要

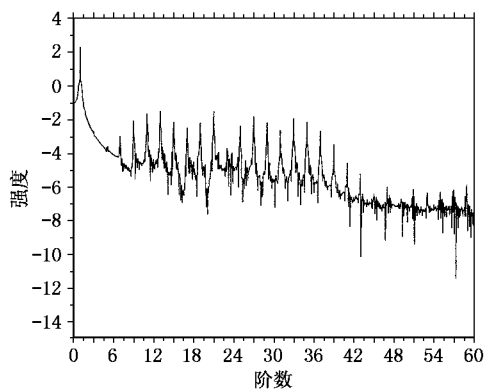


图 2 短程势原子产生的高次谐波 参数同图 1

是由束缚态-连续态之间的相互作用产生的,而连续态-连续态之间的相互作用对高次谐波的影响始终都较小. 由表 1 可知,短程势原子仅有一个基态,没有其他的束缚态,在这种情况下,自然不会有束缚态-束缚态之间的相互作用,也就不会产生低阶的高次谐波,即缺阶现象,这再一次说明原子的激发态结构对低阶的高次谐波有重要贡献.

另外,按照隧道电离区域高次谐波截止位置阶数的半经验公式,可以算出高次谐波的截止位置约在 $n = 33$ 处,与原子势的作用范围无关. 由图 1 和图 2 可以看出,本文的计算结果与由半经验公式得出的结果符合得很好,只要原子的电离势相同,无论是长程势原子还是短程势原子,高次谐波的截断位置相同.

为了研究长程势原子和短程势原子在强激光场中的电离特性,只要计算出激光脉冲结束时电子处在束缚态的概率,则由(14)式可得到电离概率,使用我们计算一维原子所提出的基函数^[13,14],计算了当激光频率 $\omega = 0.0502$ a. u. 时,长程势原子和短程势原子在激光脉冲结束时处在束缚态的概率随激光场电场振幅的变化,其结果分别如图 3 和图 4 所示. 由图可以看出,长程势原子和短程势原子处在束缚态的概率随激光场电场振幅(或激光光强)的变化明显不同. 当激光场的电场振幅增加到 0.07 a. u. 时,长程势原子处在束缚态的概率约为 40%,按照(14)式,则电离概率约为 60%,而对短程势原子,在同样的激光强度下,电离概率极其微弱,不足 1%,两者结果相差几十倍. 一般而言,束缚电子吸收足够数量的光子后就能摆脱原子的束缚而成为自由电子,从而使原子被电离,称为多光子电离. 按照多光子电离理论,只要长程势原子和短程势原子基态能量相同,

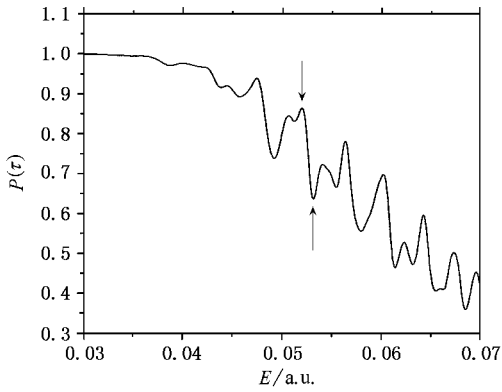


图3 激光脉冲结束时长程势原子处在束缚态的概率随场强的变化

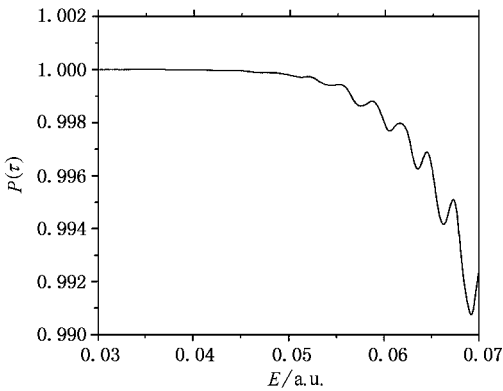


图4 激光脉冲结束时短程势原子处在束缚态的概率随场强的变化

在相同的激光光强下,多光子电离概率应该相等,但是我们的计算却显示出不同的结果.为了说明产生这种现象的原因,我们初步推断是由于长程势原子存在激发态而短程势原子没有激发态引起这种多光子电离概率的明显差别.当激光频率为 0.0502 a.u.

时,由于长程势原子和短程势原子的基态能量都是 0.5 a.u. ,原子需要吸收 10 个或 10 个以上的光子才能被电离.长程势原子由于存在激发态,它不需要一次必须吸收 10 个或 10 个以上的光子,可以将吸收这些光子的过程分为几步来完成,即先吸收几个光子,使原子由基态跃迁到某个激发态,然后再吸收几个光子由该激发态跃迁到更高的激发态,直至吸收的光子数达到 10 个或 10 个以上使原子被电离.而短程势原子由于没有中间激发态,它需要一次吸收这么多光子由基态直接跃迁到连续态,因此短程势原子的电离是直接电离.在多光子过程中,原子一次吸收的光子数越多,发生的概率越小.长程势原子的多步过程中每次吸收的光子数比短程势原子直接电离所吸收的光子数少,所以发生的概率就大得多,因此在同样的激光光强下,长程势原子电离的概率比短程势原子的电离概率就大得多.

为了证实上面的分析,我们进一步计算了激光频率为 0.0502 a.u. ,激光场的电场振幅分别为 0.0520 和 0.0533 a.u. (图 3 箭头所示位置)时长程势原子处在中间激发态的概率 $P_{\text{ex}}(t)$ 随时间的变化,其计算结果分别如图 5(a)和(b)所示.由图 5 可以看出,原子处在中间激发态的概率随时间振荡,每个周期的两个峰对应激光场的最大值和最小值.在图 5(a)中,概率峰值先随时间逐渐增大到一个极大值,然后缓慢减小,但是随后保持在中间激发态上有较大的概率峰值.在图 5(b)中, $P_{\text{ex}}(t)$ 的峰值先随时间增大到极大值,随后很快衰减,当激光脉冲结束时,保持在中间激发态概率峰值较小.所以,对应在 $E = 0.0533 \text{ a.u.}$ 处原子有较大的电离概率,而在 $E = 0.0520 \text{ a.u.}$ 处原子有较小的电离概率.在图 5(b)中原子能很快被电离可以理解为,随激光光强的变化,

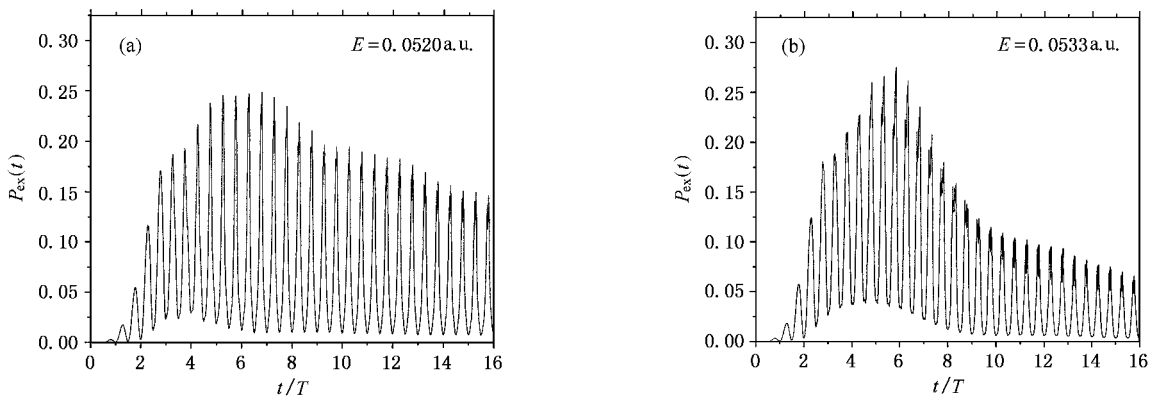


图5 长程势原子处在激发态的概率随时间的变化

原子的激发态能级会有一个移动(相应于缀饰态),而高激发的里德伯态能级的移动约为 $U_p^{[7]}$, U_p 不仅与激光频率有关,还与激光场电场的振幅有关,当激光场电场振幅变化到某一数值时,原子的某个激发态能级的移动正好与吸收一定光子数目产生的跃迁发生共振,使其很快电离,即在束缚态的概率很快变小,这就是图 3 和图 4 中原子处在束缚态的概率会随激光场电场振幅的变化发生振荡的原因. 通过上面的分析和计算,说明在多光子电离过程中,直接电离概率一般较小,电离的主要贡献来自于多步过程,而原子的激发态结构对于这种多步的电离过程起着重要作用.

4. 结 论

本文利用分裂算符方法数值求解了一维原子在强激光场中的含时薛定谔方程,研究了具有相同基态能量的一维长程势原子和短程势原子产生高次谐

波和电离概率的特点. 研究表明,在强激光场中长程势原子和短程势原子产生的高次谐波对应的平台和截止位置相同. 但长程势原子有低阶谐波产生,而短程势原子没有低阶谐波,发生了缺阶现象. 由于低阶谐波的贡献主要来自于束缚态-束缚态之间的相互作用,短程势原子只有一个束缚态,没有激发态,自然就会产生这种缺阶现象. 对于长程势原子和短程势原子在强激光场中的电离概率,在相同的激光光强下,前者的电离概率比后者电离概率大得多. 经过分析和计算,发现原子的激发态结构对原子的电离概率起着重要的作用,正是这些激发态结构的存在,使原子的电离过程能够通过多步过程完成,在每一步过程中原子吸收的光子数比直接电离过程吸收的光子数少,发生的概率就大,使得多步过程原子的电离概率远远大于直接电离概率,从而很好地解释了在相同激光光强下长程势原子的电离概率远远大于短程势原子的直接电离概率.

- [1] Perry M D and Mourou G 1994 *Science* **264** 917
- [2] Zhang J 1997 *Physica* **26** 643(in Chinese) [张 杰 1997 *物理* **26** 643]
- [3] Protopapas M ,Keitel C H and Knight P L 1997 *Rep. Prog. Phys.* **60** 389
- [4] Qu W X , Hu S X and Xu Z Z 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 825(in Chinese) [屈卫星、胡素兴、徐至展 1999 *物理学报* **48** 825]
- [5] Chen B Z 2000 *Chin. Phys.* **9** 351
- [6] Corkum P B 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 1994
- [7] Faria F de M C ,Kopold R ,Becker W and Rost J M 2002 *Phys. Rev. A* **65** 23404
- [8] Wells J C ,Simbotin I and Gaurila M 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 3479
- [9] Faria F de M C , Milosevic D B and Paulus G G 2000 *Phys. Rev. A* **61** 63415
- [10] Feit M D ,Fleck J A and Steiger A 1982 *J. Comput. Phys.* **47** 412
- [11] Keldysh L V 1965 *Sov. Phys. JETP* **20** 1307
- [12] Zhou X X and Li B W 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1902(in Chinese) [周效信、李白文 2001 *物理学报* **50** 1902]
- [13] Zhou X X and Lin C D 2000 *Phys. Rev. A* **61** 53411
- [14] Zhou X X , Li B W and Lin C D 2001 *Phys. Rev. A* **64** 43403

Investigation of the high harmonic generation and ionization of atoms with long-range and short-range potentials in intense laser fields^{*}

Li Peng-Cheng Zhou Xiao-Xin[†] Dong Chen-Zhong Zhao Song-Feng

(College of Physics and Electronic Engineering ,Northwest Normal University , Lanzhou 730070 ,China)

(Received 25 April 2003 ; revised manuscript received 23 June 2003)

Abstract

By using numerical solutions of the time-dependent Schrödinger equation for a one-dimensional atom in intense laser fields , We investigate the high harmonic generation and ionization of the long-range and short-range potential atoms . It is found that the intensities of high harmonic generation for both cases are similar , but the short-range potential atom does not radiate the low-order harmonic spectra , and the ionization probabilities of the long-range and short-range potential atoms as functions of the laser intensity are obviously different . Our results show that the excited states of the atom play an important role in the low-order harmonic spectra and ionization probabilities .

Keywords : intense laser field , high harmonic generation , ionization probability

PACC : 3280 , 4250

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant No.10274063) ,the Science Foundation from the Ministry of Education of China(Grant No.03126) and the Foundation of State Key Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics ,Wuhan Institute of Physics and Mathematics , Chinese Academy of Sciences(Grant No.T152111) .

[†] Corresponding author. E-mail : zhoux@nwnu.edu.cn