

非均匀激光场中氢分子离子高次谐波的增强

罗香怡 刘海凤 贵帅 刘学深

Enhancement of high-order harmonic generation from H_2^+ in near plasmon-enhanced laser field

Luo Xiang-Yi Liu Hai-Feng Ben Shuai Liu Xue-Shen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 123201 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.123201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.123201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I12>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

红外激光场中共振结构原子对极紫外光脉冲的压缩效应

Compression of extreme ultraviolet pulse for atom with resonant structure exposed to an infrared laser field

物理学报.2016, 65(10): 103202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.103202>

调制激光场中 Rydberg 原子的电磁感应透明

Electromagnetically induced transparency of Rydberg atoms in modulated laser fields

物理学报.2016, 65(10): 103201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.103201>

氢负离子在少周期激光场中解离时的干涉效应

Interference effect in the photodetachment from H ion in a few-cycle laser pulse

物理学报.2016, 65(8): 083202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.083202>

激光驱动晶体发射高次谐波的特性研究

Study of high-order harmonic generation in crystals exposed to laser fields

物理学报.2016, 65(6): 063201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.063201>

势函数对强激光辐照下原子高次谐波辐射的影响

Influence of atomic potential on the generation of high harmonic generation from the atoms irradiated by mid-infrared laser pulses

物理学报.2016, 65(3): 033201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.033201>

非均匀激光场中氢分子离子高次谐波的增强*

罗香怡¹⁾²⁾ 刘海凤²⁾ 贲帅²⁾ 刘学深^{2)†}

1)(白城师范学院物理与电子信息学院, 白城 137000)

2)(吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012)

(2016年1月20日收到; 2016年4月5日收到修改稿)

通过数值求解非波恩-奥本海默近似下的一维含时薛定谔方程, 研究了蝴蝶结型纳米结构基元中氢分子离子高次谐波的产生。研究表明, 在蝴蝶结型纳米结构基元内部产生的非均匀场的空间位置对高次谐波的发射有较大影响。当非均匀场的空间位置从30 a.u. 平移到-30 a.u. 时, 高次谐波的截止位置被延展且形成光滑的超连续的谐波谱, 并应用时频分析方法、经典三步模型以及电离概率等解释了高次谐波发射的物理机理。研究了高次谐波谱对非均匀场空间位置的依赖性与载波包络值的关系, 发现随着载波包络值的变化, 非均匀场在不同空间位置处的高次谐波谱变化趋势相同。

关键词: 非均匀激光场, 高次谐波, 空间位置, 纳米结构空隙

PACS: 32.80.Rm, 42.65.Ky, 78.67.Bf

DOI: 10.7498/aps.65.123201

1 引言

阿秒科学可以描述和跟踪原子和分子内部电子的超快动力学过程, 目前实验上高次谐波是产生阿秒脉冲的首选途径。高次谐波一般具有以下特征: 在低阶次谐波强度迅速下降, 然后出现一个转化效率几乎是常数的平台区, 最后在某一阶次谐波强度突然下降。高次谐波的这种机制可以很好地通过半经典三步模型来解释^[1]。第一步, 在激光场的作用下库仑势发生畸变, 势的一边被压低, 电子隧穿该势垒从而发生电离; 第二步, 电离的电子可以被看做自由电子, 不受库仑势的作用, 在外场中自由运动, 电子在激光场的作用下加速; 最后, 当激光场反向后电子有可能回到母离子附近与母核复合, 同时将在激光场中获得的多余能量以光子的形式辐射出来。这个过程成功地解释了高次谐波的产生。

目前, 在实验上和理论上利用金属纳米结构的场增强效应从原子中产生高次谐波已经有广泛

的研究。在实验上, Kim等^[2]成功利用金属纳米结构的场增强效应来产生高次谐波。自此以后, 对非均匀场下高次谐波的产生引起了许多人的注意。Husakou等^[3]提出了在金属纳米结构附近场增强效应产生高次谐波的半经典模型。Yavuz^[4]理论上研究了蝴蝶结型金属纳米结构附近电子的动力学并且发现在纳米结构空隙内气体原子系综的分布对高次谐波的发射起重要作用。Xue等^[5]考虑蝴蝶结型的金属纳米结构, 通过利用有限时域差分的方法数值求解了麦克斯韦方程组给出了等离激元加强场的时空分布。Zhong等^[6]通过伪谱方法数值求解了三维含时薛定谔方程, 研究了氢原子在三种不同形式的非均匀场下的高次谐波发射并进行了比较。我们^[7]理论上研究了初态为基态与第一激发态等权叠加的一维氦离子在空间非均匀啁啾双色场驱动下氦离子的高次谐波发射及孤立阿秒脉冲的产生。

由于分子结构和自由度都比原子更加复杂^[8,9], 因此, 分子高次谐波的研究已经吸引了许多人的关注^[10,11]。如在波恩-奥本海默近似下即

* 国家自然科学基金(批准号: 61575077, 11271158)资助的课题。

† 通信作者。E-mail: liuxs@jlu.edu.cn

核固定的情况下研究分子高次谐波, 即忽略了电子和核波包的耦合效应^[12–15]。非波恩-奥本海默近似下分子高次谐波的研究越来越引起人们的重视。例如, Zhang 等^[16]在非波恩-奥本海默近似下通过数值求解含时薛定谔方程研究了氢分子离子高次谐波谱的空间分布。Yavuz 等^[17]模拟了氢分子离子在金属纳米结构附近场增强效应产生高次谐波, 结果表明从场增强激光场中产生分子高次谐波是可能的, 且分子高次谐波的截止能量是 $4U_p$ 。他们也发现核运动相对于核静止情况下的高次谐波效率有较大的提高。

本文研究了非均匀激光场在纳米结构空隙中心附近不同空间位置下的氢分子离子高次谐波的产生。通过理论计算表明非均匀场在纳米结构空隙中心附近不同位置时对氢分子离子高次谐波的产生有较大影响。当非均匀场向 z 轴正方向移动时, 高次谐波的截止向低阶次缩短。当非均匀场向 z 轴负方向移动时, 高次谐波的截止被延展且形成了一个光滑的超连续谐波谱。此外还研究了高次谐波谱对非均匀场空间位置的依赖性与载波包络值的关系, 发现随着载波包络值的变化, 非均匀场在不同空间位置处的高次谐波谱变化趋势相同。

2 理论方法

我们求解非波恩-奥本海默近似下线性极化等离子体增强激光场与氢分子离子相互作用下的一维含时薛定谔方程^[18,19]。在偶极近似和长度规范下, 一维含时薛定谔方程由下式给出(原子单位 a.u.):

$$\begin{aligned} & i \frac{\partial}{\partial t} \psi(z, R, t) \\ &= [H_n(R) + H_{el}(z, R, t)] \psi(z, R, t), \end{aligned} \quad (1)$$

其中

$$H_n(R) = -\frac{1}{m_p} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R}, \quad (2)$$

$$\begin{aligned} H_{el}(z, R, t) = & -\frac{2m_p + m_e}{4m_p m_e} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_c(z, R) \\ & + V_l(z, t, z_0) \end{aligned} \quad (3)$$

是核和电子的哈密顿量。 $V_c(z, R)$ 是软核库仑势, 对于氢分子离子可以写成如下形式:

$$\begin{aligned} & V_c(z, R) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{(z + R/2)^2 + 1}} - \frac{1}{\sqrt{(z - R/2)^2 + 1}}, \end{aligned} \quad (4)$$

$V_l(z, t, z_0)$ 是激光场和分子相互作用势, 表达式是

$$\begin{aligned} & V_l(z, t, z_0) \\ &= -\frac{2m_p + 2m_e}{2m_p + m_e} z E(t) [1 + g(z + z_0)], \end{aligned} \quad (5)$$

R 是核间距, m_e 和 m_p 是电子和质子的质量 ($m_e = 1$, $m_p = 1836$), z 是对应两个核的质量中心的电子坐标, $1 + g(z + z_0) = 1 + \sum_{i=1}^N b_i (z + z_0)^i$ 是等离子体增强场的多项式形式, b_i 可以通过有限时域差分模拟获得。本文中考虑非均匀场的形式是蝴蝶结型纳米结构基元两个尖端空隙的距离是 18 nm, 与文献[5] 中表达的形式相似, $1 + g(z + z_0)$ 的表示形式是

$$\begin{aligned} & 1 + g(z + z_0) \\ &= 1 + 5.2 \times 10^{-8} (z + z_0) + 3.0 \times 10^{-5} (z + z_0)^2 \\ & - 2.5 \times 10^{-12} (z + z_0)^3 - 3.4 \times 10^{-10} (z + z_0)^4. \end{aligned} \quad (6)$$

图 1 表示的是蝴蝶结型纳米结构和非均匀激光场的空间位置示意图。图中红色的三角形表示的是纳米结构的蝴蝶结型基元, 以两个纳米结构尖端空隙的中心点为坐标原点, 两个纳米结构尖端的连线为 z 轴建立坐标轴, 分子放在坐标原点处。蓝色曲线表示的是空间对称的非均匀场, z_0 表示的是空间非均匀场的对称中心相对于坐标原点的距离。

我们使用线性极化激光场

$$E(t) = E_0 f(t) \sin(\omega_0 t + \varphi), \quad (7)$$

E_0 和 ω_0 是驱动激光场的峰值振幅和频率, φ 是载波包络相位。采用高斯型包络 $f(t) = \exp[-4 \ln(2)(t^2/\tau^2)]$, τ 是激光场的半高全宽。

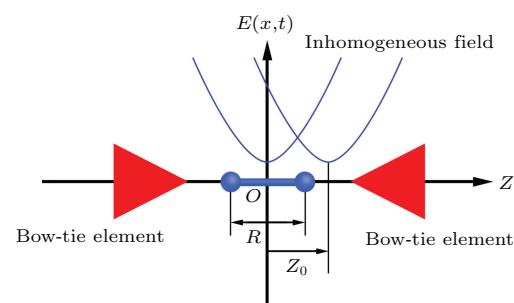


图 1 (网刊彩色) 蝴蝶结型纳米结构基元和非均匀激光场的空间位置示意图

Fig. 1. (color online) Schema of the bow-tie shape of the nanostructure elements and the spatial position of the inhomogeneous laser field.

使用分裂算符快速傅里叶变换的方法数值求解了方程(1)^[20,21]. 初始波函数通过虚时演化的办法求出. 在计算中, 为了避免电子波包传播到边界时发生非物理反射, 需要在边界上放一吸收函数, 这里我们引入 $\cos^{1/8}$ 面具函数, 它在两端较窄的范围内从 1 降到 0.

电子的电离概率

$$P(t) = 1 - \int_0^R dR \int_{-z_1}^{z_1} dz |\psi(z, R, t)|^2 \\ (z_1 = 20 \text{ a.u.}). \quad (8)$$

与时间有关的偶极加速度

$$a(t) = \langle \psi(z, R, t) | -\frac{\partial}{\partial z} V_c(z, R) \\ - \frac{\partial}{\partial z} V_1(z, t, z_0) | \psi(z, R, t) \rangle. \quad (9)$$

高次谐波谱能够通过 $a(t)$ 的傅里叶变换得到,

$$P_A(\omega) = \left| \frac{1}{T} \int_0^T a(t) e^{-i\omega t} dt \right|^2. \quad (10)$$

3 结果和讨论

我们首先研究金属纳米结构中心附近氢分子离子高次谐波的产生. 入射激光场的峰值强度、脉冲持续时间和波长分别为 $I = 4 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, 3 fs 和 800 nm, 对应的载波包络相位为零. 图 2 给出了非均匀场被平移到空间位置为 $z_0 = 0 \text{ a.u.}$, $z_0 = 30 \text{ a.u.}$ 和 $z_0 = -30 \text{ a.u.}$ 处的氢分子离子的高次谐波谱. 当 $z_0 = 0 \text{ a.u.}$ 时, 谐波谱如图中黑色实线所示, 截止位置大约在 68th, 并且谐波大约从 28th 开始变得连续, 对应的超连续谐波谱的宽度为 40th. 当 $z_0 = 30 \text{ a.u.}$ 时, 谐波谱如图中红色长虚线所示, 截止位置大约在 58th, 连续谐波谱出现较强的调制, 短量子轨道之间的干涉较强. 当 $z_0 = -30 \text{ a.u.}$ 时, 谐波谱如图中绿色点虚线所示, 截止位置大约在 90th, 并且谐波大约从 27th 开始变得连续, 对应的超连续谐波谱的宽度为 63th. 以上分析结果表明在纳米结构尖端空隙内非均匀场的空间位置对于核运动情况下氢分子离子高次谐波的发射具有较大影响.

为了进一步理解随着非均匀场空间位置变化产生的高次谐波的物理机理, 我们通过小波变换方法研究了连续谱的时频分析^[22]. 图 3 给出了当非均匀场的空间位置分别在 0, 30 和 -30 a.u. 时高次谐波谱的时频分布. 从图 3 中我们看到非均匀场

空间位置在 0, 30 和 -30 a.u. 时, 有一个能量峰值对高次谐波谱有贡献, 在图中分别用 P_1 , P_2 和 P_3 标记. 每一个峰值的上升沿和下降沿分别对应着长量子轨道和短量子轨道. 当非均匀场的空间位置从 0 a.u. 平移到 30 a.u. 时, P_2 峰对应的谐波阶次下降并且有两个电子轨道对谐波产生贡献, 高次谐波谱出现较强的调制结构. 当非均匀场的空间位置从 0 a.u. 平移到 -30 a.u. 时, P_3 峰对应的谐波阶次增加并且长量子轨道消失只剩下短量子轨道对谐波产生贡献. 因此高次谐波谱变得更加平滑且超连续谐波谱的宽度增加. 结果与在图 2 中给出的高次谐波谱相一致.

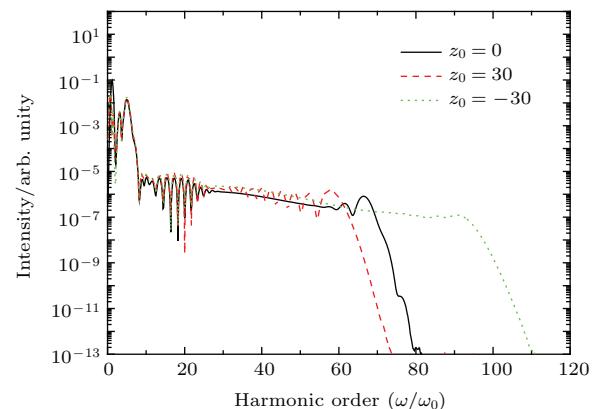


图 2 (网刊彩色) 金属纳米结构中心附近氢分子离子的高次谐波谱, 其中空间非均匀场的对称中心相对于坐标原点的距离 $z_0 = 0 \text{ a.u.}$ (黑色实线), $z_0 = 30 \text{ a.u.}$ (红色长虚线), $z_0 = -30 \text{ a.u.}$ (绿色点虚线)

Fig. 2. (color online) High-order harmonic spectra of the H_2^+ molecule with the nuclear motion near the metallic nanostructures, where the electronic coordinate with respect to the center of mass of the two nuclei $z_0 = 0 \text{ a.u.}$ (black solid line), $z_0 = 30 \text{ a.u.}$ (red dashed line) and $z_0 = -30 \text{ a.u.}$ (green dotted line).

图 4 是驱动激光场(蓝色实线)和非均匀场在不同位置时的电离概率. 从电离概率曲线我们看到, 氢分子离子开始电离是在激光场的峰值 C 处, 即时刻 -0.25 o.c. (o.c. 表示的是光学周期), 然后电离概率开始快速增加. 电子主要被电离大约从 -0.25 o.c. 到 0 o.c. , 激光场反转方向, 电子在激光场的驱动下向母核运动并且在 0.5 o.c. 时与它的母离子复合发射出谐波光子, 结果与图 3 相一致.

从图 4 中的电离曲线我们看到在 -0.25 o.c. 之前电离概率的增加是非常缓慢的. 因此我们根据半经典三步模型计算了时间区域从 -0.5 o.c. 到 2.0 o.c. 的谐波辐射随着电离时间(红色圆形)和发射时间(绿色三角形)的变化曲线, 且非均匀场空

间位置分别在 0, 30 和 -30 a.u., 如图 5 所示. 从图 5 中我们看到, 在三种情况下的电离主要集中在大约 -0.25 o.c. 处的峰值 B_1 , B'_1 和 B''_1 附近, 与图 4 中激光场的峰值 C 相对应. 而大约在 0.5 o.c.

处的峰值 A_1 , A'_1 和 A''_1 处回复与母核复合发射高次谐波, 与图 4 中激光场的峰值 C' 相对应. 三种情况下发射时间的峰值 A_1 , A'_1 和 A''_1 与图 3(a)—图 3(c) 中的峰值 P_1 , P_2 和 P_3 相对应.

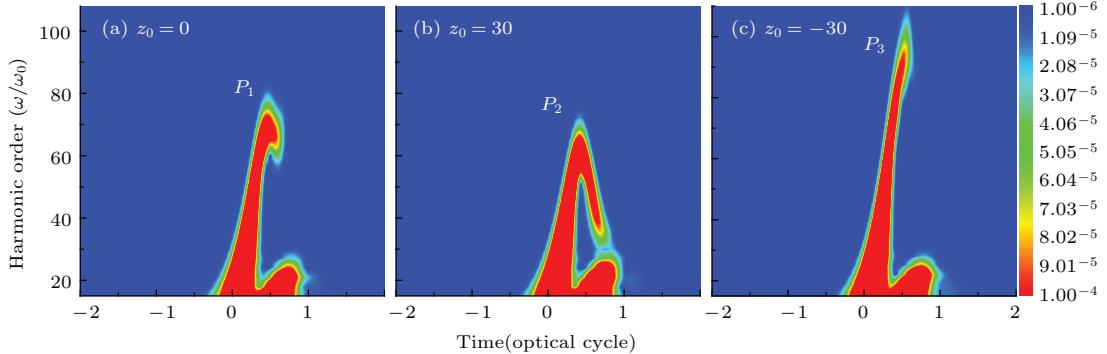


图 3 (网刊彩色) 当非均匀场的空间位置是 0 a.u., 30 a.u. 和 -30 a.u. 时高次谐波谱的时频分布

Fig. 3. (color online) The time-frequency distribution of the HHG spectra when inhomogeneous field translated to different spatial positions, which are 0 a.u., 30 a.u., and -30 a.u., respectively.

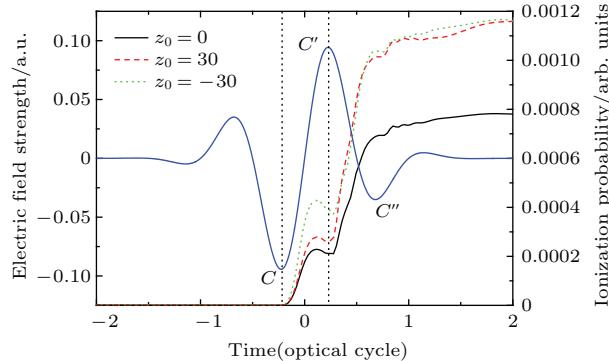


图 4 (网刊彩色) 驱动激光场(蓝色实线)和非均匀场的空间位置被平移到不同位置时的电离概率

Fig. 4. (color online) Electric field of the driving laser (the solid blue curve) and the ionization probability with the inhomogeneous field translated to different positions.

当非均匀场从 0 a.u. 平移到 30 a.u. 时, 谐波平台向低频方向缩短并且在每一时刻有长短两条电子轨道对谐波有贡献. 当非均匀场从 0 a.u. 平移到 -30 a.u. 时, 谐波平台向高频方向延展且只有短量子轨道对谐波有贡献. 结果与图 2 中高次谐波谱和图 3 中的时频分布相一致.

为了研究载波包络相位对高次谐波发射的影响, 图 6 给出了载波包络相位 $\varphi = 0.2\pi$ 和 $\varphi = -0.2\pi$ 时非均匀场被平移到空间位置为 $z_0 = 0$ a.u., $z_0 = 30$ a.u. 和 $z_0 = -30$ a.u. 处时氢分子离子的高次谐波谱, 其他激光参数与图 2 中的参数相同. 从图 6(a) 中看到, 当载波包络相位 $\varphi = 0.2\pi$ 时, 非均匀场被平移到空间位置为

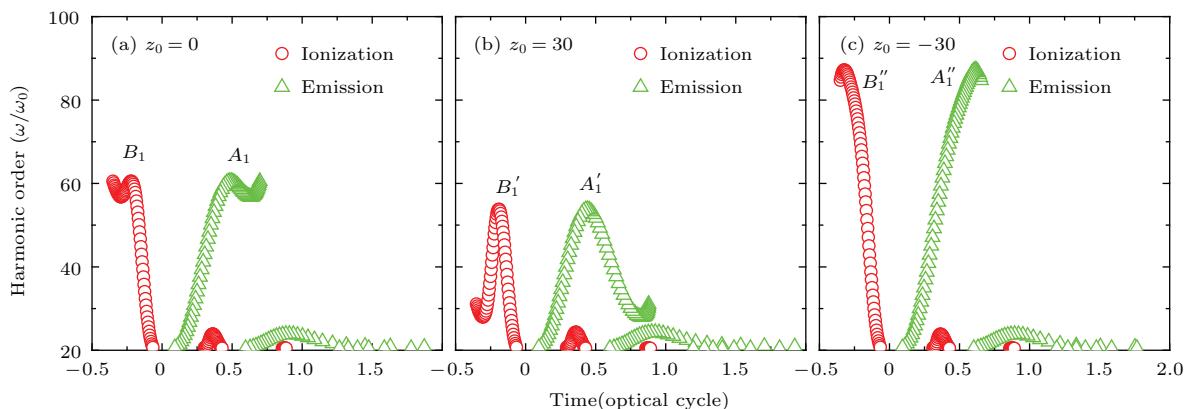


图 5 (网刊彩色) 当非均匀场被平移到不同空间位置时, 时间区域从 -0.5 o.c. 到 2.0 o.c. 的谐波辐射随着电离时间(红色圆形)和发射时间(绿色三角形)的变化曲线

Fig. 5. (color online) The dependence of the harmonic order on the ionization (red circles) and emission times (green triangle) in the region of time from -0.5 to 2.0 optical cycle ((a), (b) and (c)) for the inhomogeneous field translated to different spatial positions (corresponding to HHG of Fig. 2), respectively.

$z_0 = 0$ a.u., $z_0 = 30$ a.u. 和 $z_0 = -30$ a.u. 处时氢分子离子的高次谐波谱被延展, 特别是当 $z_0 = -30$ a.u. 时形成了宽度大约为 100th 的超连续谐波谱。从图 6(b) 中看到, 当载波包络相位 $\varphi = -0.2\pi$ 时, 非均匀场被平移到空间位置为 $z_0 = 0$ a.u., $z_0 = 30$ a.u. 和 $z_0 = -30$ a.u. 处时氢分子离子的高次谐波谱缩短。以上分析表明载波包络相位对氢分子离子的高次谐波发射有较大影响。但是从图 6 中我们看到, 无论载波包络值怎么变化, 高次谐波谱对空间位置依赖性的整体趋势是不变的, 当非均匀场从 0 a.u. 平移到 30.0 a.u. 时, 谐波平台向低频方向缩短, 当非均匀场从 0 a.u. 平移到 -30.0 a.u. 时, 谐波平台向高频方向延展。即在空

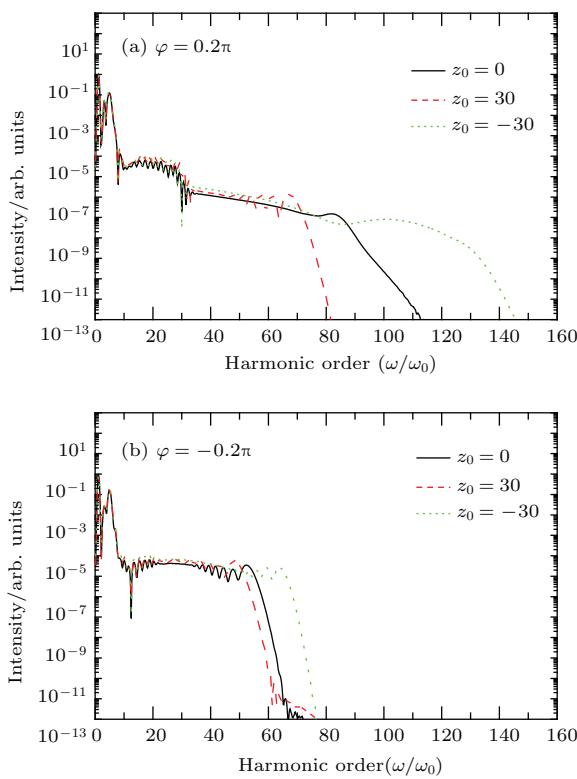


图 6 (网刊彩色) 金属纳米结构中心附近氢分子离子的高次谐波谱, 其中空间非均匀场的对称中心相对于坐标原点的距离 $z_0 = 0$ a.u. (黑色实线), $z_0 = 30$ a.u. (红色长虚线), $z_0 = -30$ a.u. (绿色点虚线) (a) 载波包络相位 $\varphi = 0.2\pi$; (b) 载波包络相位 $\varphi = -0.2\pi$; 其他激光参数与图 2 中的相同

Fig. 6. (color online) High-order harmonic spectra of the H_2^+ molecule with the nuclear motion near the metallic nanostructures, where the electronic coordinate with respect to the center of mass of the two nuclei $z_0 = 0$ a.u. (black solid line), $z_0 = 30$ a.u. (red dashed line) and $z_0 = -30$ a.u. (green dotted line). (a) The carrier-envelope phase $\varphi = 0.2\pi$; (b) the carrier-envelope phase $\varphi = -0.2\pi$. The other laser parameters are the same as those in Fig. 2.

间非均匀场中通过适当选取载波包络相位值可以获得较大延展的光滑的超连续谱。

4 结 论

我们数值求解非波恩-奥本海默近似下的一维含时薛定谔方程研究了氢分子离子在少周期空间非均匀场作用下的高次谐波发射。计算结果表明非均匀场在纳米结构尖端内部的不同空间位置对高次谐波发射有较大影响。当非均匀场的空间位置从 0 a.u. 平移到 30 a.u. 时, 高次谐波发射的截止位置向着低阶次方向缩短并且有长量子轨道和短量子轨道对谐波发射产生贡献, 因此谐波谱具有较大的调制。当非均匀场的空间位置从 0 a.u. 平移到 -30 a.u. 时, 高次谐波发射的截止位置向着高阶次方向延展且形成了宽度为 63th 的超连续谐波谱。我们应用时频分析方法、半经典三步模型和驱动激光场以及电离概率曲线很好地解释了高次谐波产生的物理机理。本文还研究了载波包络相位对高次谐波发射的影响, 发现在文中所选取的激光参数下, 载波包络相位的变化对高次谐波谱有较大影响, 但是随着载波包络相位值的变化, 非均匀场空间位置对高次谐波谱的影响的变化趋势是相同的。

参考文献

- [1] Corkum P B 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 1994
- [2] Kim S, Jin J, Kim Y J, Park I Y, Kim Y, Kim S W 2008 *Nature* **453** 757
- [3] Husakou A, Im S J, Herrmann J 2011 *Phys. Rev. A* **83** 043839
- [4] Yavuz I 2013 *Phys. Rev. A* **87** 053815
- [5] Xue S, Du H C, Xia Y, Hu B T 2015 *Chin. Phys. B* **24** 054210
- [6] Zhong H Y, Guo J, Feng W, Li P C, Liu X S 2016 *Phys. Lett. A* **380** 188
- [7] Luo X Y, Ben S, Ge X L, Wang Q, Guo J, Liu X S 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 193201 (in Chinese) [罗香怡, 贲帅, 葛鑫磊, 王群, 郭静, 刘学深 2015 物理学报 **64** 193201]
- [8] Nguyen N T, Hoang V H, Le V H 2013 *Phys. Rev. A* **88** 023824
- [9] Kamta G L, Bandrauk A D 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 203003
- [10] Jin C, Le A T, Lin C D 2011 *Phys. Rev. A* **83** 053409
- [11] Pan Y, Zhao S F, Zhou X X 2013 *Phys. Rev. A* **87** 035805
- [12] Chelkowski S, Foisy C, Bandrauk A D 1998 *Phys. Rev. A* **57** 1176

- [13] Han Y C, Madsen L B 2013 *Phys. Rev. A* **87** 043404
[14] Guan X, Bartschat K, Schneider B I, Koesterke L 2013
Phys. Rev. A **88** 043402
[15] Yuan K J, Bandrauk A D 2011 *Phys. Rev. A* **83** 063422
[16] Zhang J, Ge X L, Wang T, Xu T T, Guo J, Liu X S
2015 *Phys. Rev. A* **92** 013418
[17] Yavuz I, Tikman Y, Altun Z 2015 *Phys. Rev. A* **92**
023413
[18] Bandrauk A D, Chelkowski S, Kawata I 2003 *Phys. Rev. A* **67** 013407
[19] Lein M, Kreibich T, Gross E K U, Engel V 2002 *Phys. Rev. A* **65** 033403
[20] Hermann M R, Fleck Jr J A 1988 *Phys. Rev. A* **38** 6000
[21] Feit M D, Fleck Jr J A 1983 *J. Chem. Phys.* **78** 301
[22] Antoine P, Piraux B, Maquet A 1995 *Phys. Rev. A* **51**
R1750

Enhancement of high-order harmonic generation from H_2^+ in near plasmon-enhanced laser field*

Luo Xiang-Yi^{1,2)} Liu Hai-Feng²⁾ Ben Shuai²⁾ Liu Xue-Shen^{2)†}

1) (College of Physics and Electronic Information, Baicheng Normal University, Baicheng 137000, China)

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

(Received 20 January 2016; revised manuscript received 5 April 2016)

Abstract

High-order harmonic generation (HHG) from the interaction among intense laserfields and atoms and molecules has attracted much attention. It is of the paramount importance and is still a rapidly growing field due to its potential to produce coherent and bright light within the uv and soft X-ray region and to generate attosecond pulses. Generally speaking, a typical spectrum of HHG shows that for the first few harmonics decrease rapidly, then present by a broad plateau of almost constant conversion efficiency, and end up with a sharp cutoff. In a recent experiment, it is verified that the field enhancement induced around the bow-tie elements with a 20-nm gap allows the generation of extreme-ultraviolet light directly from the output of a single femtosecond oscillator of 100-kW peak power. With the development of the HHG in the vicinity of metallic nanostructure from atomic responses, the harmonic generation in the vicinity of metallic nanostructure from molecules has also been investigated. In this paper, HHG from H_2^+ in bowtie-shaped nanostructure is investigated by solving the one-dimensional time-dependent Schrödinger equation within the non-Born-Oppenheimer approximation by the splitting-operator fast-Fourier transform technique. We find that the spatial position of the inhomogeneous field inside the nanostructure has a great influence on the harmonic spectrum. When the spatial position of the inhomogeneous field is translated from 30 a.u. to -30 a.u., the cutoff of the HHG can be extended and the smoother supercontinuum harmonic spectrum is formed. The underlying physical mechanism can be well demonstrated by the time-frequency distribution, the three-step model, the ionization probability and electric field of the driving laser. The harmonic order as a function of the ionization time and emission time can be given by the semi-classical three-step model. The trajectory with an earlier ionization time but a later emission time as a long electronic trajectory, and the trajectory with a later ionization time but an earlier emission time as a short electronic trajectory. The interference between the long and the short trajectories will lead to a modulated structure of the supercontinuum. When the spatial position of the inhomogeneous field is translated from 0 a.u. to 30 a.u., the cutoff of the HHG can be shortened and there are short and long electronic trajectories contributing to each harmonics and bringing about more modulations. When the spatial position of the inhomogeneous field is translated from 0 a.u. to -30 a.u., the cutoff of the HHG can be extended and there is only a short electronic trajectory contributing to each harmonics and the smoother supercontinuum harmonic spectrum is formed. The effects of the carrier-envelope phase on HHG is also demonstrated. When the carrier-envelope phase is 0.2π , the cutoff of the HHG is extended. When the carrier-envelope phase is -0.2π , the cutoff of the HHG is shortened. But we find that with the change of the carrier-envelope phase, their overall trends are the same, that is, the cutoff of the HHG is extended when the spatial position of the inhomogeneous field is translated from 30 a.u. to -30 a.u..

Keywords: inhomogeneous laser field, high-order harmonics, spacial positions, nanostructure gap

PACS: 32.80.Rm, 42.65.Ky, 78.67.Bf

DOI: 10.7498/aps.65.123201

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grand Nos. 61575077, 11271158).

† Corresponding author. E-mail: liuxs@jlu.edu.cn