

文章编号: 1007-4627(2002)02-0257-04

用谱拟合法计算强激光场中氢原子的高次谐波谱*

乔豪学, 李白文

(中国科学院武汉物理与数学研究所核磁共振与原子分子物理国家重点实验室, 湖北 武汉 430072)

摘要: 介绍了一种新的求解含时薛定谔方程的谱拟合法. 该方法把含时波函数在少量且分布稀疏的网格点上拟合, 结合泰勒级数展开, 用相对简单的计算得到包括 Δt 高次项贡献的含时波函数. 并将这一方法用于强激光场中氢原子高次谐波谱的计算, 得到了与其它方法一致的结果.

关键词: 谱拟合法; 泰勒级数; 高次谐波

中图分类号: O562.3 **文献标识码:** A

1 引言

实验上已观察到原子分子在强激光场中的多光子过程如高次谐波、隧道电离和电离抑制, 从理论上研究这些非线性多光子过程不仅具有理论上的意义, 而且也为一系列可能的潜在应用奠定基础. 而理论研究都归结为求解含时薛定谔方程, 目前大致有三类理论方法来处理这个问题, 即微扰法、解析法或半解析法和直接数值求解法. 微扰法不能适应太强的激光场, 而解析或半解析法往往需要很粗略的近似, 所以直接数值求解法应用更为广泛. Floquet 方法^[1, 2]的求解过程很费时, 而且只能用来求解周期性的激光场, 而我们的光源往往是脉冲, 这使得这一方法的应用受到限制. 有限差分法^[3]是比较经典的算法, 但这一方法要求所取网格点很密, 对计算机的内存和速度要求很高. Close-coupling^[4]方法需要计算大量的矩阵元, 还要求解耦合的微分方程组, 计算过程也很复杂. 最小二乘拟合法^[5]是将波函数在网格点上做时间演化, 这样不需要计算矩阵元, 但每演化一步都要求解一个线性方程组, 其维数等于网格点数. 分裂算符法^[6]用矩阵乘法代替了解线性方程组, 大大加快了时间演化的计算速度, 但它的误差在其时间演化步长 Δt 三次方量级, 对于长时间的演化会有数值稳定性的问题. 本文介绍了一种新的谱拟合法, 不但继承了分

裂算符法的优点, 而且用很简单的计算得到 Δt 高次项的贡献.

2 理论方法

为简单起见, 采用实验室坐标系中强激光场下的一维原子模型来介绍我们的方法. 偶级近似下, 含时薛定谔方程(原子单位下)写为

$$i \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = [\hat{H}_0(r) + \hat{H}_i(r)] \Psi(r, t), \quad (1)$$

$$\hat{H}_0(r) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{\sqrt{r^2 + 1}}, \quad (2)$$

$$\hat{H}_i(r) = -E(t)r. \quad (3)$$

对于一般的数值处理, r 截断为: $r \in [-R_{\max}, R_{\max}]$. 为方便以下所述网格点方法处理, 引入变换参数 R_0 , 采用如下变换将处理区间变为 $[-1, 1]$:

$$r = r(x) = R_0 \frac{x}{1 + (R_0/R_{\max}) - x^2}. \quad (4)$$

现定义 $\Psi(x, t) = \Psi[r(x), t] / \sqrt{r'(x)}$, (1)式中的含时薛定谔方程变换为如下形式:

$$i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = [\hat{H}_0(x) + \hat{H}_i(x)] \Psi(x, t), \quad (5)$$

$$\hat{H}_0(x) = -\frac{1}{2} \frac{1}{[r'(x)]^2} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{\sqrt{[r(x)]^2 + 1}} - \frac{1.5[1 + (R_0/R_{\max})]}{[1 + (R_0/R_{\max}) + x^2]^2 [r'(x)]^2}, \quad (6)$$

收稿日期: 2002-02-28; 修改日期: 2002-04-09

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目资助项目

作者简介: 乔豪学(1970-), 男(土家族), 湖北鹤峰人, 副研究员, 从事原子分子物理研究.

$$\hat{H}_i(x) = -E(t)r(x)\sin(\omega t + \varphi). \tag{7}$$

为避免截断边界波函数与反射波之间的干涉, 采用如下形式的吸收子:

$$f[r(x)] = \begin{cases} \cos^{1/8} \left[\frac{r(x) + R_0}{2(R_{\max} - R_0)} \pi \right] & -R_{\max} \leq r(x) \leq -R_A, \\ 1 & -R_A < r(x) < R_A, \\ \cos^{1/8} \left[\frac{r(x) - R_0}{2(R_{\max} - R_0)} \pi \right] & R_A \leq r(x) \leq R_{\max}. \end{cases} \tag{8}$$

这样变换后的波函数的边界条件是 $\Psi(-1, t) = \Psi(1, t) = 0$. 应用一般的谱方法^[7], 空间波函数可近似用 Legendre 多项式展开:

$$\Psi(x, t) = \sum_{i=0}^N C_i(t) P_i(x). \tag{9}$$

考虑边界条件, 运用 Gauss-Legendre-Lobatto 积分, 展开系数表示如下:

$$C_i(t) = \int_{-1}^1 \frac{2i+1}{2} \Psi(x, t) P_i(x) dx = \sum_{j=1}^{N-1} \frac{2i+1}{2} W_j \Psi(x_j) P_i(x_j), \tag{10}$$

x_j 是高斯积分点, 积分权重 W_j 为

$$W_j = \frac{2}{N(N+1)} \frac{1}{[P_N(x_j)]^2}. \tag{11}$$

因此波函数可展开成:

$$\Psi(x, t) = \sum_{j=1}^{N-1} f_j(x) \Psi(x_j, t), \tag{12}$$

$$f_j(x) = \frac{1}{N(N+1)P_N(x_j)} \frac{(x^2 - 1)P'_N(x)}{x - x_j}. \tag{13}$$

这样, 含时薛定谔方程可以在网格点 $\{x_m = 1, N-1\}$ 上表示为

$$i \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \Big|_{x=x_m} = \sum_{n=1}^{N-1} [\hat{H}_0(x) + \hat{H}_i(x)] f_n(x) \Psi(x_n, t) \Big|_{x=x_m}. \tag{14}$$

对于如下的矩阵:

$$H'_{mn} = \hat{H}_i(x) f_n(x) \Big|_{x=x_m} = E(t)r(x_m)\delta_{mn}, \tag{15}$$

由于它是对角的, 所以可被定义成一个矢量: $\mathbf{H}'_m = -E(t)r(x_m)$. 把含时波函数在网格点上对时间的导数也定义成如下一个矢量:

$$\Psi^{(n)} = \left[\frac{\partial^n \Psi(x_1, t)}{\partial t^n}, \frac{\partial^n \Psi(x_2, t)}{\partial t^n}, \dots, \frac{\partial^n \Psi(x_{N-1}, t)}{\partial t^n} \right]. \tag{16}$$

现定义一个操作矩阵: $H^0_{mn} = \hat{H}_0(x) f_n(x) \Big|_{x=x_m}$, 其矩阵元具有如下的解析形式:

$$H^0_{mn} = \begin{cases} \frac{N(N+1)}{6(1-x_n^2)} \frac{1}{[r'(x_n)]^2} - \frac{1}{\sqrt{r^2(x) + 1}} - \frac{1.5[1 + (R_0/R_{\max})]}{[1 + (R_0/R_{\max}) + x_n^2]^2 [r'(x)]^2} & m = n, \\ (-1)^{m+n} \frac{\sqrt{W_n}}{\sqrt{W_m}} \frac{1}{(x_m - x_n)^2} \frac{1}{[r'(x)]^2} & m \neq n. \end{cases} \tag{17}$$

由此, 波函数对时间的各阶导数可通过简单的矩阵与矢量乘法计算得到:

$$i\Psi^{(1)}(x_m, t) = \sum_{n=1}^{N-1} H^0_{mn} \Psi(x_n, t) + \mathbf{H}'_m \Psi(x_m, t), \tag{18}$$

$$i\Psi^{(2)}(x_m, t) = \sum_{n=1}^{N-1} H_{m,n}^0 \Psi^{(1)}(x_n, t) + \mathbf{H}'_m \Psi^{(1)}(x_m, t) + H_m^{(1)} \Psi(x_m, t), \quad (19)$$

$$i\Psi^{(K)}(x_m, t) = \sum_{n=1}^{N-1} H_{m,n}^0 \Psi^{(K-1)}(x_n, t) + \mathbf{H}'_m \Psi^{(K-1)}(x_m, t) + \sum_{j=1}^{K-1} (K-j) H_m^{(j)} \Psi^{(K-j-1)}(x_m, t), \quad (20)$$

其中 $H_m^{(n)} = d^n H'_m / dt^n$ 表示 \mathbf{H}'_m 矢量对时间的 n 阶导数. 通过泰勒级数展开法可从 t 时刻的波函数得到 $t + \Delta t$ 时刻的波函数:

$$\Psi(x_j, t + \Delta t) = \sum_{n=0}^K \frac{1}{n!} \Psi^{(n)}(x_j, t) (\Delta t)^n + O[(\Delta t)^{K+1}]. \quad (21)$$

因此, 用如上所述方法可从初始波函数得到任意时刻的波函数.

3 结果和讨论

计算中我们采用如下形式的激光场:

$$E(t) = \begin{cases} E_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{6T}\right) \sin \omega t & 0 \leq t \leq 3T \\ E_0 \sin \omega t & t > 3T, \end{cases} \quad (22)$$

其中 E_0 为激光的振幅, T 为周期. 首先我们采用如下的激光场参数: $E_0 = 0.1$ atomic unit, $\omega = 0.148$ atomic unit, 网格点参数为: $R_0 = 200$, $R_{max} = 300$ atomic unit, 演化时间 $t = 16 T$, 网格点数为 400. 图 1 给出了体系的高次谐波谱, 在奇数阶有共振峰的出现, 但在 13 阶以上就不再有峰的出现, 这与经典的解释^[8] 以及 Zhou 等^[5] 的计算是一致的. 另外一组参数是: $E_0 = 0.08$ atomic unit, $\omega = 0.06$ atomic unit, 结果如图 2 所示, 高次谐波在 35 阶以后逐渐消失, 这与唯象的解释^[8] 符合得很好.

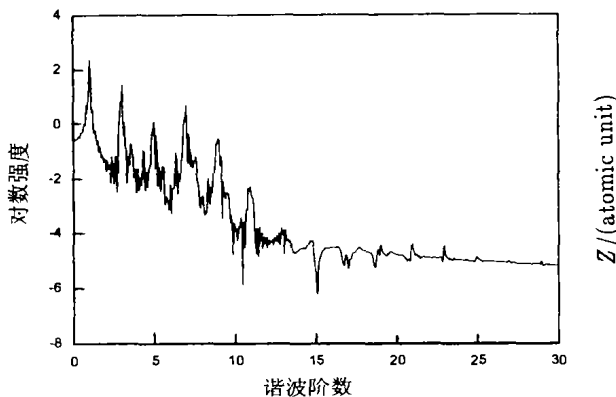


图 1 强激光场下氢原子的高次谐波谱

激光场参数: $E_0 = 0.1$ atomic unit, $\omega = 0.148$ atomic unit; 网格点参数: $R_0 = 200$, $R_{max} = 300$ atomic unit, 演化时间 $t = 16 T$.

我们认为谱拟合法的计算误差来源于空间操作

和时间演化两个方面. 空间操作指 (18), (19) 和 (20) 式中的矩阵矢量乘法计算. 由于 N 阶 Gauss 积分对 $2N$ 阶的多项式积分是绝对精确的, 因此在 (9) 式近似展开的前提下, 从 (10) 到 (20) 式的推导都是精确成立的. 所以在时间演化的过程中, 每一次空间操作都是精确的, 不会带来新的误差. 那么主要的计算误差就来源于 (21) 式中的泰勒级数展开, 但我们可以根据实际需要引入时间步长的高次项来提高计算精度. 而在分裂算符法中, 其精度只能在时间步长的三次方量级, 要得到高次项的贡献需要很复杂的计算和大量的机时. 综上所述, 谱拟合法具有以下 4 个优点: 第一, 我们采用的网格点是

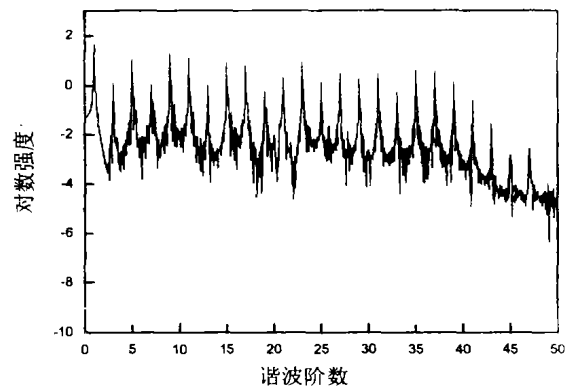


图 2 强激光场下氢原子的高次谐波谱

激光场参数: $E_0 = 0.08$ atomic unit, $\omega = 0.06$ atomic unit; 网格点参数: $R_0 = 200$, $R_{max} = 300$ atomic unit, 演化时间 $t = 16 T$.

Gauss 积分点, 这比一般的网格点方法所需的网点数要少得多; 第二, 利用 Gauss 积分的特点, 在时间演化过程中所有的空间操作都是精确的, 这确保了计算的数值稳定性; 第三, 能方便地得到时间步长高次项的贡献, 这在其它的方法中都比较困难;

第四, 本方法计算简单, 演化过程只需要简单的矩阵-矢量乘法计算, 这样能大大节省机时.

参 考 文 献:

- [1] Potvliege R M, Shakeshaft R. Time-independent Theory of Multiphoton Ionization of an Atom by an Intense Field[J]. Phys Rev, 1998, **A38**: 4 597.
- [2] Potvliege R M, Shakeshaft R. Multiphoton Processes in an Intense Laser Field: Harmonic generation and total ionization rates for atomic hydrogen[J]. Phys Rev, 1999, **A40**: 3 061.
- [3] Kulander K C, Sandhya K R, Koonin S E. Time-dependent Hartree-Fock Theory of Charge Exchange: Application to $\text{He}^{2+} + \text{He}$ [J]. Phys Rev, 1982, **A25**: 2 968.
- [4] Fritsh W, Lin C D. The Semi-classical Close-coupling Description of Atomic Collisions: Recent developments and results[J]. Phys Rep, 1991, **202**: 1.
- [5] Zhou X, Lin C D. Linear-least-squares Fitting Method for the Solution of the Time-dependent Schrödinger Equation: Applications to atoms in intense laser fields[J]. Phys Rev, 2000, **A61**: 053411.
- [6] Wang J, Chu S I, Laughlin C. Multiphoton Detachment of H^- : II Intensity-dependent photodetachment rates and threshold behavior-complex-scaling generalized pseudospectral method[J]. Phys Rev, 1994, **A50**: 3 208.
- [7] Canuto C, Hussaini M Y, Quarteroni A, *et al.* Spectral Methods in Fluid Dynamics[M]. Berlin: Springer, 1988.
- [8] Corkum P B. Plasma Perspective on Strong Field Multiphoton Ionization[J] Phys Rev Lett, 1993, **71**: 1 994.

A New Spectral Fitting Method and Its Application to High Order Harmonic Generation Spectra of Hydrogen in Intense Laser Field

QIAO Hao-xue, LI Bai-wen

(Laboratory of Magnetic Resonance and Molecular Physics, Wuhan Institute of Physics and Mathematics, Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430071, China)

Abstract: A new spectral fitting method for solving the time-dependent Schrödinger equation has been developed and applied to the atom in intense laser fields. By using this method, the time-dependent wave functions are determined with few and far between discrete mesh points. And the high accuracy wave functions with contribution of high-order-term of Δt are obtained by using Taylor series expand method. Our method is proved by computing high order harmonic generation spectra of hydrogen in laser fields, and the results are in agreement with other calculations.

Key words: spectra fitting; Taylor series; high order harmonic generation