

强场方程解的边界完备性与高次谐波平台*

杨玉军, 朱顺人

(吉林大学原子与分子物理研究所, 吉林 长春 130023)

摘要: 使用二阶对称分拆光谱方法和一维短程势原子模型对强光辐照下原子的高次谐波谱进行了重新计算, 第一次实现了强场方程解的边界完备性, 从而获得了更为清晰的谐波谱和展宽的谐波平台.

关键词: 对称分拆算符方法; 高次谐波; 强激光场

中图分类号: O562.3+1 **文献标识码:** A

1 引言

高次谐波发射(HHG)作为小型桌面 X 光激光光源^[1]的一个优选物理方案在近 20 年里一直是强场物理中的一个十分突出的研究方向. 以原子物理的视角观察这个过程, 问题首先归结为求解强激光场激励下的含时 Schrödinger 方程. 迄今为止, 求解该方程的主流方案是以 Kulander 等^[2]为代表的数值积分方法.

该方法首先需要人为设定边界条件, 然后再通过积分该方程得到体系的状态, 这样必然导致对体系状态描述的准确性出现偏差. 但是这一过程原本为一初值问题, 并非边值问题, 即我们只知道激光到来前原子体系的状态, 然后该系统在激光作用下演化. 为了按照过程的本来面貌来描述它, 彻底避开现行方法中人为设定的边界条件, 需要寻求新的途径.

2 二阶对称分拆算符光谱方法

二阶对称分拆算符方法起源于 20 世纪 70 年代, 用于求解光学波导模轴向波动方程的本征值问题^[3], 并由朱时宜等^[4]引入到求解强场问题, 它有很多内禀的优点^[5].

对于含时 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = H\Psi(\mathbf{r}, t)$$

可以证明, 在很小但有限的时间间隔 τ 内

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \tau) = U(t + \tau, t)\Psi(\mathbf{r}, t) + O(\tau^3),$$

其中, 时间演化算符

$$U(t + \tau, t) = e^{-i(\tau/2)H_1} e^{-i(\tau/2)H_2} \dots \\ e^{-i\tau V(t, \tau, \mathbf{r})} \dots e^{-i(\tau/2)H_2} e^{-i(\tau/2)H_1},$$

$H_1, H_2, \dots, V, \dots, H_2, H_1$ 是对体系总哈密顿的对称分拆. 其中 $H_0 = H_1 + H_2 + \dots$ 为体系总哈密顿中非含时部分, $V(\mathbf{r}, t, \tau)$ 为体系的含时部分. 如果将时间演化算符对称分拆成 $e^{-i(\tau/2)H_0} e^{-i\tau V(t, \tau, \mathbf{r})} e^{-i(\tau/2)H_0}$ (其中 H_0 为自由原子哈密顿量), 则称这种特定的分拆方法为光谱方法.

将对称分拆时间演化算符的光谱方法用于含时 Schrödinger 方程的求解可以克服人为设定边界条件所带来的不可靠性问题. 对于较大的场强, 电子在激光场的策动下, 可以在很短的时间内运动到离核很远的地方, 电子波包很快运动到计算的边界, 即使人为设定吸收势和面具函数, 也无法从根本上解决边界完备性问题. 因为这需要取更远的边界来适应更大的场强, 而现有的计算技术和设备无法完成这个功能.

为了了解人为设定边界外粒子对高次谐波的贡献, 我们将该方程的求解分为两个区域处理, 即内区和外区. 对于内区, 我们采取数值计算方法求解. 对于外区, 即 $V(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ 的区域, 自由原子能量本征

收稿日期: 2002 - 03 - 20; 修改日期: 2002 - 04 - 29

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(19874025)

作者简介: 杨玉军(1974—), 男(汉族), 辽宁抚顺人, 博士研究生, 从事强激光场和原子相互作用研究.

方程在该区的解为比较简单的函数, 在该区可采用解析方法求解, 然后结合内区的结果, 使问题得到清晰完备的解决. 通过对电子波包全域的计算, 可以真正了解远处电子对高次谐波产生的贡献, 进而为准确研究高次谐波产生过程奠定基础.

3 算例与讨论

(1) 原子的一维模型 选取短程势

$$U(x) = -\frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)}$$

$(U_0 > 0, \alpha > 0),$

相应的自由原子哈密顿方程为

$$H_0 \Psi(x) = \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{U_0}{\cosh^2(\alpha x)} \right] \Psi(x)$$

$= E \Psi(x).$

该方程在全能域的本征解均可表为解析形式超几何函数, 这有助于减小数值计算误差对结果的影响. 同时, 由于短程作用, 在不大的空间区域外, 该方程的本征解退化为更为简单的三角函数和指数函数, 可以解析求解这部分的积分.

(2) 入射激光 选取钛宝石激光作为入射激光, 脉冲包络为正弦函数的平形式. 在电偶极矩近似和长度规范下, 电子在激光场中的势能函数为

$$V(x, t) = [F_0 \sin^2(\Omega t) \sin(\omega t)] x,$$

其中 $\omega = 0.057$ atomic unit (钛宝石激光中心频率), 取 $\Omega = 0.0114$, F_0 为 0.06 和 0.07 atomic unit, 对应的峰值场强分别为 1.26×10^{14} 和 1.72×10^{14} W/cm².

(3) 表象选择和算符分拆 本文采用的时间演化算符的对称分拆形式为

$$\Psi(t + \tau) = e^{-i(\tau/2)H_0} e^{-i\tau V(t+\beta\tau)x} e^{-i(\tau/2)H_0} \Psi(t),$$

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t) |n\rangle + \int d\epsilon C_\epsilon(t) |\epsilon\rangle,$$

其中 $|n\rangle, |\epsilon\rangle$ 为 H_0 的本征矢.

$$\begin{aligned} \therefore c_E(t + \tau) &= e^{-i(\tau/2)E} \langle E | e^{-i\tau V(t+\beta\tau)x} | \cdot \\ & \left(\sum_n e^{-i(\tau/2)E_n} c_n(t) |n\rangle + \int d\epsilon' \cdot \right. \\ & \left. e^{-i(\tau/2)\epsilon'} c_{\epsilon'}(t) |\epsilon'\rangle \right) \\ &= e^{-i(\tau/2)E} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_E(x) e^{-i\tau V(t+\beta\tau)x} \cdot \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \left. \sum_n e^{-i(\tau/2)E_n} c_n(t) \Psi_n(x) dx + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_E(x) e^{-i\tau V(t+\beta\tau)x} \int_0^{\infty} d\epsilon' \cdot \right. \\ & \left. e^{-i(\tau/2)\epsilon'} c_{\epsilon'}(t) \Psi_{\epsilon'}(x) dx \right] \\ &= e^{-i(\tau/2)E} \left\{ \int_{-\infty}^{-B} [\Psi_E^A(x) e^{-i\tau V(t+\beta\tau)x} \cdot \right. \\ & \sum_n e^{-i(\tau/2)E_n} c_n(t) \Psi_n^A(x) dx + \int_{-\infty}^{-B} \Psi_E^A(x) e^{-i\tau V(t+\beta\tau)x} \int_0^{\infty} d\epsilon' \cdot \\ & \left. e^{-i(\tau/2)\epsilon'} c_{\epsilon'}(t) \Psi_{\epsilon'}^A(x) dx] + \int_{-B}^B [\Psi_E(x) e^{-i\tau V(t+\beta\tau)x} \sum_n e^{-i(\tau/2)E_n} \cdot \right. \\ & c_n(t) \Psi_n(x) dx + \int_{-B}^B \Psi_E(x) e^{-i\tau V(t+\beta\tau)x} \cdot \\ & \left. \int_0^{\infty} d\epsilon' e^{-i(\tau/2)\epsilon'} c_{\epsilon'}(t) \Psi_{\epsilon'}(x) dx] + \int_B^{\infty} [\Psi_E^A(x) e^{-i\tau V(t+\beta\tau)x} \sum_n e^{-i(\tau/2)E_n} \cdot \right. \\ & c_n(t) \Psi_n^A(x) dx + \int_B^{\infty} \Psi_E^A(x) e^{-i\tau V(t+\beta\tau)x} \cdot \\ & \left. \int_0^{\infty} d\epsilon' e^{-i(\tau/2)\epsilon'} c_{\epsilon'}(t) \Psi_{\epsilon'}^A(x) dx] \right\}, \end{aligned}$$

其中 B 为 $V(x) > 0$ 时的边界. Ψ_E^A-, Ψ_E^A+ 分别为能量为 E 的本征函数在 $x \rightarrow -\infty$ 和 $x \rightarrow \infty$ 时的本征解.

电偶极矩(加速度规范)

$$d_A(t) = -\langle \Psi(x, t) | \frac{\partial V(x)}{\partial x} | \Psi(x, t) \rangle,$$

$$d_A(\omega) = \frac{1}{t_f - t_i} \frac{1}{\omega^2} \int_{t_i}^{t_f} d_A(t) e^{-i\omega t} dt.$$

高次谐波发射功率谱

$$P_A(\omega) = |d_A(\omega)|^2.$$

根据对高次谐波谱的分析(见图 1), 我们看到:

(1) 取有限边界, 其平台截止点对场强 0.06 和 0.07 atomic unit 分别为 25 次和 31 次, 符合 $3.17U_p + I_p$ 的理论预言. 我们考虑边界外的信息后, 高次谐波的截止频率大约增加一个 U_p . 这是因为, 原来没考虑的边界外的电子波包, 具有更大的能量, 这些原来被人为漏掉的电子, 在激光场的作用下返回到母粒子, 放出更大能量的光子, 从而使谐波平台得以展宽.

(2) 和有限边界相比, 无穷边界具有更好的谐波行为, 即谐波比较清晰. 为模拟实验短脉冲的实际, 我们在计算中采用的激光脉冲宽度为 280

atomic unit, 可知入射激光本身并非单色光. 即使

如此, 入射激光傅立叶谱仍集中在中心频率附近.

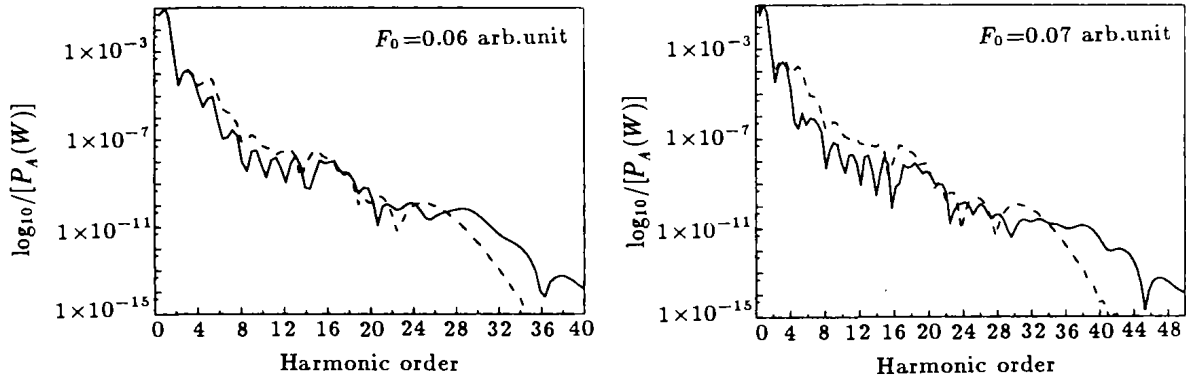


图 1 高次谐波发射功率谱

因此在谐波谱仍然应该清晰看到奇次谐波峰. 但是对有限边界的计算, 谐波不是很明显; 对于完备边界的计算, 由于包含边界外的波包向内和由核区向

外传播的波包发生量子干涉, 产生的电子波包具有极为丰富的动能分布, 这些电子再复合, 产生了应有的奇次谐波峰.

参 考 文 献:

- [1] Protopapas M, *et al.* Atomic Physics with Super-high Intensity Lasers[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1997, 390.
- [2] Kenneth C Kulander, Kenneth J Schafer, Jeffrey L Krause. Time-dependent Studies of Multiphoton Processes[C]. In: Mihai Gavrilă, *Progresses. Atoms in Intense Laser Fields*. New York: Academic Progress, 1992, 427.
- [3] Fleck J A, Morris Jr, J R, Feit M D. Time-dependent Propagation of High Energy laser Beams Through the Atmosphere [J]. *Appl Phys*, 1976, 10: 129.
- [4] Jiang T F, Chu S I. High-order Harmonic Generation in Atomic Hydrogen at 248 nm; Dipole-moment versus acceleration spectrum[J]. *Phys Rev*, 1992, A46 (11): 7 322.
- [5] 朱顺人, 杨玉军, 周忠源. 强场方程的二阶对称分拆算符解法 [C]. 徐至展主编 *强场激光物理*. 北京: 中国高等科学技术中心, 2001, 153.

Solution's Integrity of Intense Laser Field Schrödinger Equation and High-order Harmonic's Plateau *

YANG Yu-jun, ZHU Qi-ren

(Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun 130023, China)

Abstract: An exact solution of the intense-field Schrödinger equation is obtained by using the 1D short-range potential model and symmetrically splitting time-evolution operator spectral method. This solution is the first one defined in the full space without any pre-assumed boundary condition. A novel high-order harmonic spectrum is computed based on our wavefunctions. It is found that this spectrum displays clearer harmonic peaks and a wider plateau than that predicted by $I_p + 3.2U_p$.

Key words: symmetrically splitting operator method; high-order harmonics; intense laser field

* Foundation item: National Natural Science Foundation of China (19874025)