

二能级三维氢原子模型中强激光场的谐波发射*

陆赫林¹ 王顺金^{1,2;1)}

1 (四川大学物理系 成都 610064)

2 (兰州重离子加速器国家实验室核理论中心 兰州 730000)

摘要 在强激光场中三维二能级氢原子模型的基础上, 对其含时 Schrödinger 方程进行了非微扰的数值求解, 得到了激光场的高次谐波谱.

关键词 三维二能级氢原子模型 含时 Schrödinger 方程 高次谐波

1 引言

最近随着强激光的出现, 强辐射场与原子的相互作用, 出现了一些新物理效应. 其中强激光场与氢原子的作用, 已经有实验观测到高于激光频率上百次和更高次谐波^[1]. 高次谐波发射将可能应用于产生远紫外线和软 X 射线激光.

高次谐波可以用半经典理论给出一个直观的解释^[2, 3]. 当强激光与原子相互作用时, 电子通过隧道电离穿过原子势垒, 从基态跃迁到连续态(此时速度接近于 0), 电子就由束缚电子变为准自由电子. 准自由电子在线偏振光的作用下做加速运动, 然后在激光场的下半周期, 电子沿线偏振方向往返于原子核附近, 以一定的几率回到原来的束缚态, 把电子获得的能量以能量为 $E = \hbar\omega$ 的光子形式发射出去, 其能量的来源为电离能和电子在激光场中获得的平均颤动能. 发射光子的最大能量表示为

$$E_{\max} = I_P + 3U_P, \quad (1)$$

其中 I_P 为原子电离能, U_P 为电子在强度为 E 的激光场中获得的动能.

本文采用二能级三维氢原子与激光相互作用的物理模型进行数值计算. 在此之前, 文献[4]采用一维二能级氢原子模型计算高次谐波谱. 本文的三维氢原子模型更为真实.

2 激光场与氢原子作用的二能级模型

为了计算方便和突出物理本质, 本文采用原子单位 ($\hbar = m = e = 1$). 入射激光场采用线偏振强激光, 沿 z 轴方向极化, 频率为 ω

$$E(t) = E_0 \sin(\omega t). \quad (2)$$

在强激光场作用下, 氢原子的波函数 $\psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi, t)$ 所满足的 Schrödinger 方程为

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi, t) = (H_0 + H_{\text{int}}) \psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi, t), \quad (3)$$

其中 H_0 为氢原子哈密顿量

$$H_0 = -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + V_0(r), \quad (4)$$

$V_0(r)$ 为库仑势, H_{int} 是激光场与氢原子相互作用部分的哈密顿量,

$$H_{\text{int}} = -E(t)r \cos(\theta), \quad (5)$$

当 H_{int} 为 0 时, Schrödinger 方程为

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi, t) = H_0 \psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi, t), \quad (6)$$

其定态解为氢原子的本征波函数

$$\Psi_{nlm}(\mathbf{r}, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(r, \theta, \varphi), \quad (7)$$

2006 - 01 - 25 收稿

* 国家自然科学基金(10375039, 90503008), 教育部博士点基金和中国科学院兰州重离子加速器国家实验室核理论中心基金资助

1) E-mail: sjwang@home.swjtu.edu.cn

$$H_0\Psi_{nlm}(\mathbf{r}, \theta, \varphi) = E_n\Psi_{nlm}(\mathbf{r}, \theta, \varphi), \quad (8)$$

当 H_{int} 不为0时, 方程(4)解 $\psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi, t)$ 可按定态解 Ψ_{nlm} 展开, 得

$$\Psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi, t) = \sum_{nlm} C_{nlm}(t)e^{-iE_n t}\Psi_{nlm}(\mathbf{r}, \theta, \varphi), \quad (9)$$

将(9)式代入(3), 得展开式系数的运动方程,

$$\frac{dC_{nlm}(t)}{dt} = \frac{1}{i} \sum_{n'l'm'} \langle nlm|H_{\text{int}}|n'l'm'\rangle C_{n'l'm'}(t)e^{-i\omega_{n'n}t}, \quad (10a)$$

式中

$$\omega_{n'n} = E_{n'} - E_n, \quad (10b)$$

上式中偶级跃迁矩阵元如下

$$(H_{\text{int}})_{nlm, n'l'm'} = \langle nlm|H_{\text{int}}|n'l'm'\rangle. \quad (10c)$$

定义 P 为宇称算符

$$PH_{\text{int}}P^{-1} = -H_{\text{int}}, \quad (11a)$$

$$P|nlm\rangle = (-1)^l|nlm\rangle, \quad (11b)$$

由上式看出, 相互作用部分哈密顿量为奇宇称, 根据宇称守恒, 要求从态 $|n'l'm'\rangle$ 到态 $|nlm\rangle$ 跃迁, 宇称改变, 由此得出如下选择定则

$$\Delta l = l' - l = \pm 1. \quad (12)$$

另外, 相互作用部分哈密顿量可表示如下球谐函数形式

$$H_{\text{int}} = -\sqrt{\frac{4\pi}{3}}E(t)rY_{10}, \quad (13)$$

由上式相互作用矩阵元可以写为

$$(H_{\text{int}})_{nlm, n'l'm'} = \left\langle nlm \left| -\sqrt{\frac{4\pi}{3}}E(t)rY_{10} \right| n'l'm' \right\rangle, \quad (14)$$

从上式可以看到, 相互作用哈密顿算符不改变磁量子数, 又由于

$$\langle m|m'\rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\varphi} d\varphi = \delta_{m,m'}, \quad (15)$$

所以还可以得到一项选择定则

$$\Delta m = m' - m = 0. \quad (16)$$

由于氢原子初态为基态 ($m=0$), 能级结构选用基态和一个激发态, 因此, (11a) 可以简化为如下形式

$$\frac{dC_{n'l0}(t)}{dt} = \frac{1}{i} \sum_{n''l''} \langle n'l0|H_{\text{int}}|n''l''=l\pm 10\rangle \times C_{n''l''0}(t)e^{-i\omega_{n''n}t}, \quad (17a)$$

当 $m \neq 0$ 时, 有

$$C_{nlm}(t) = 0, \quad (17b)$$

由上面分析可得耦合迭代方程组

$$\frac{dC_{100}(t)}{dt} = \frac{1}{i} \langle 100|H_{\text{int}}|n10\rangle C_{n10}(t)e^{-i\omega_{n1}t}, \quad (18a)$$

$$\frac{dC_{n00}(t)}{dt} = \frac{1}{i} \langle n00|H_{\text{int}}|n10\rangle C_{n10}(t), \quad (18b)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_{n10}(t)}{dt} = & \frac{1}{i} \langle n10|H_{\text{int}}|100\rangle C_{100}(t)e^{-i\omega_{1n}t} + \\ & \frac{1}{i} \langle n10|H_{\text{int}}|n00\rangle C_{n00}(t) + \\ & \frac{1}{i} \langle n10|H_{\text{int}}|n20\rangle C_{n20}(t), \end{aligned} \quad (18c)$$

其余方程可以依此类推. 在具体计算中可以看情况做截断. 解出 $C_{nlm}(t)$ 后, 代入(9)式, 这样就能得到(3)式的解.

根据 Ehrenfest 定理

$$\frac{d^2\bar{r}}{dt^2} = \overline{F(r)} = -\overline{\nabla V(r)}, \quad (19a)$$

$$V = V_0 + H_{\text{int}}. \quad (19b)$$

由波函数可计算随时间演化的电偶极加速度:

$$a_x = \langle \Psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi, t) \left| -\frac{\partial V_0}{\partial x} \right| \Psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi, t) \rangle, \quad (20a)$$

$$a_y = \langle \Psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi, t) \left| -\frac{\partial V_0}{\partial y} \right| \Psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi, t) \rangle, \quad (20b)$$

$$a_z = \langle \Psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi, t) \left| -\frac{\partial V_0}{\partial z} + E(t) \right| \Psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi, t) \rangle, \quad (20c)$$

进而计算电偶极辐射总功率^[5]

$$P(t) = \frac{a_x^2 + a_y^2 + a_z^2}{12\pi\epsilon_0 c^3}, \quad (21a)$$

为了分析强激光场中氢原子发射的高次谐波谱, 需对(21a)进行 Fourier 频谱分析:

$$P(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} P(t)e^{i\omega t} dt. \quad (21b)$$

3 三维二能级模型数值计算及结果

三维含时 Schrödinger 方程数值求解计算量很大, 必须借助于大型计算机^[6]. 为了便于计算, 同时又不失物理本质, 根据前面关于氢原子在激光场中高次谐波发射的半经典理论, 对高次谐波有主要贡献的是近电离态的电子向基态跃迁的结果. 所以在实际计算中, 可以建造一个近电离态和基态的氢原子谐波发射的二能级模型.

在对以上二能级模型进行数值计算时, 分别选取氢原子 $n=1$ 的基态和 $n=10$ 和 $n=50$ 的里德堡近电离态进行计算. 线偏振光参数^[3], 强度 E_0 取为 $0.05a.u.$, ω_1 为 $0.056a.u.$ 其中对 $n=10$ 的近电离态的角动量不变子空间没有作进一步的截断, 而对 $n=50$ 的里德堡近电离态的角动量做了截断.

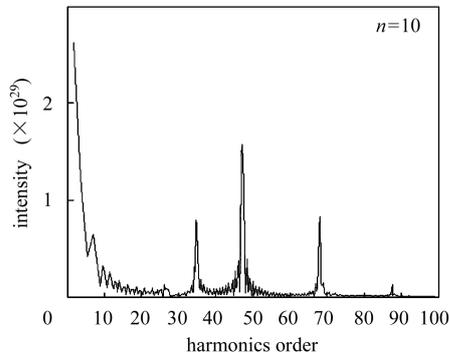


图 1 近电离态 $n=10$ 谐波谱

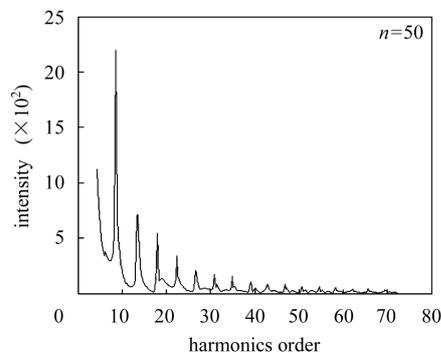


图 2 近电离态 $n=50$ 谐波谱

在实际数值计算中, 对方程(18)数值解, 采用 Runge-Kutta-Fehlberg 自适应步长算法可以获得较高的精度. 方程(18)的初始条件为氢原子基态:

$$\Psi(\mathbf{r}, \theta, \varphi, t=0) = \Psi_{100}(\mathbf{r}, \theta, \varphi), \quad (22a)$$

$$C_{nlm}(0) = \delta_{1,n} \delta_{0,l} \delta_{0,m}. \quad (22b)$$

对公式 (20a)—(20c) 进行数值积分, 最后对偶极辐射总功率 (21a) 进行快速 Fourier 变换, 所得谐波发射功率的频谱如图 1 和图 2. 横坐标所示为高次谐波相对于入射激光的频率倍数, 高次谐波谱在开始的少数几个波数下降很快, 然后出现一个平台区, 在此平台区所有的谐波有几乎相同的强度, 然后快速截止.

4 结果分析与讨论

上述二能级模型, 对电子态的处理是量子力学的, 对激光场的处理是经典的, 计算谐波功率时用了半经典近似. 计算结果表明, 上述二能级模型能演示强激光场与原子相互作用时激光场高次谐波的产生. 从图 1 与图 2 对比中, 可以看出, 二能级高次谐波主要由远离基态的近电离态产生, n 越高, 产生的高次谐波的频率和幅度越大, 与以前的半经典解释符合.

高次谐波的产生也可以从耦合迭代方程组(18)中看出, 方程组中通过多次迭代, 频率得到倍增, 再通过电偶极作用矩阵元的进一步耦合, 频率再次倍增. 对高次谐波有主要贡献的是高能级和同一能级中大角动量项. 在对 $n=50$ 的子空间进行的数值计算过程中, 为了讨论角量 l 空间截断的收敛性, 在已有 l 截断子空间的基础上多增加一项 (第 $l+1$ 项) 进行计算, 所得到谐波谱与图 2 相比较发现, 谐波的低次部分几乎相重合, 因此可以认为低次谐波截断的收敛性较好. 但谐波的高次部分的幅值比图 2 稍大. 这是因为第 $l+1$ 项与其他项耦合迭代会导致高次谐波的幅度较低次谐波的幅度有更明显的增加, 但还是保留了高次谐波谱结构的主要特征. 因此, 本文的计算结果能比较真实地反映强场中氢原子的低次谐波谱. 只要扩大角量 l 空间的维数 (这样一来, 计算会大大增加), 原则上可以得到所需要考虑的高次谐波的较为可靠的振幅.

总之, 上述二能级半量子、半经典模型的计算结果, 有助于理解激光与原子相互作用时高次谐波产生的机理, 有一定的理论意义和实际参考价值.

参考文献(References)

- 1 Ann L' Huillier, Balcou Ph. Phys. Rev. Lett., 1993, **70**: 774
- 2 ZHOU X X, LI B W. Acta Phys. Sin., 2001, **50**: 1902(in Chinese)
(周效信, 李白文. 物理学报, 2001, **50**: 1902)
- 3 WU H T, GONG S Q et al. Acta Opt. Sin., 2000, **20**: 440(in Chinese)
(吴海涛, 龚尚庆等. 光学学报, 2000, **20**: 440)
- 4 Lewenstein M, Balcou Ph. Phys. Rev., 1994, **A49**: 2117
- 5 LI X X, TENG H G et al. Acta Opt. Sin., 1996, **16**: 930(in Chinese)
(李学信, 腾华国等. 光学学报, 1996, **16**: 930)
- 6 WANG Y H. Electrodynamics. Lanzhou: Lanzhou University Press, 1995 (in Chinese)
(汪映海. 电动力学. 兰州: 兰州大学出版社, 1995)
- 7 Jeffrey L Krause. Phys. Rev., 1992, **A45**: 4998

High-Harmonic Generation by Intense Laser Fields Interacting with Atoms in Three Dimensional and Two-Level Hydrogen Atom Model^{*}

LU He-Lin¹ WANG Shun-Jin^{1,2;1)}

1 (Department of Physics, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

2 (Center of Theoretical Nuclear Physics,
National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, Lanzhou 730000, China)

Abstract We construct a three dimensional two-level hydrogen model in intense laser fields, and solve the time-dependent Schrödinger equation non-perturbatively and numerically. The high-order harmonic generation spectrum is obtained.

Key words 3-dimensional two-level hydrogen model, time-dependent Schrödinger equation, high-order harmonics

Received 25 January 2006

^{*} Supported by National Natural Science Foundation of China (10375039, 90503008), Doctoral Education Fund of Education Ministry of China and Center of Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, CAS

1) E-mail: sjwang@home.swjtu.edu.cn