

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2018.02.023

# 利用 $\text{He}^+$ 离子链模型增强谐波辐射强度

刘航<sup>1</sup>, 冯立强<sup>2,3</sup>

(1. 辽宁工业大学化学与环境工程学院, 锦州 121001;

2. 中国科学院大连化学物理研究所分子反应动力学国家重点实验室, 大连 116023;

3. 辽宁工业大学理学院, 锦州 121001)

**摘要:** 本文提出一种利用  $\text{He}^+$  离子链模型来增强谐波辐射强度的方案. 通过求解薛定谔方程, 理论模拟了单个  $\text{He}^+$  离子以及  $\text{He}^+$  离子链辐射谐波的特点, 并结合电离几率, 谐波辐射时频分析图, 含时电子波包运动分析了谐波辐射及电子运动过程. 计算结果表明, 使用  $\text{He}^+$  离子链模型可以有效增强谐波强度以及延伸谐波截止能量.

**关键词:** 高次谐波;  $\text{He}^+$  离子链; 谐波强度增强; 谐波截止能量展宽

**中图分类号:** O562.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 0490-6756(2018)02-0349-04

## Enhancement of harmonic intensity by using $\text{He}^+$ ion chain model

LIU Hang<sup>1</sup>, FENG Li-Qiang<sup>2,3</sup>

(1. School of Chemical and Environmental Engineering, Liaoning University of Technology, Jinzhou 121001, China;

2. State Key Laboratory of Molecular Reaction Dynamics, Dalian Institute of Chemical Physics Chinese Academy of Sciences, Dalian 116023, China;

3. College of Science, Liaoning University of Technology, Jinzhou 121001, China)

**Abstract:** In the present paper, we propose an effective method to enhance the intensity of the harmonic spectrum by using the  $\text{He}^+$  ion chain model. Through solving the time-dependent Schrödinger equation, the harmonic spectra from the single  $\text{He}^+$  ion and the  $\text{He}^+$  ion chain have been theoretically calculated. Moreover, the ionization probabilities, the time-frequency analyses of the harmonic spectra and the time dependent wave functions have been used to explain the harmonic emission process and the electron motion. Results show that the harmonic intensity can be remarkably enhanced and the harmonic cutoff can be extended by using the  $\text{He}^+$  ion chain model.

**Keywords:** High-order harmonic generation;  $\text{He}^+$  ion chain; Enhancement of harmonic intensity; Extension of harmonic cutoff

## 1 引言

激光诱导高次谐波是强激光物理领域中最重要现象之一. 由于其在制备极紫外以及 X 射线光源中有巨大的应用价值, 过去已对高次谐波进行

了大量研究<sup>[1-4]</sup>.

一般来说, 激光与原子相互作用产生高次谐波可以通过‘电离-加速-回碰’三步模型<sup>[5]</sup>来描述. 其谐波截止能量为  $E_{\text{cutoff}} = I_p + 3.17 U_p$  ( $I_p$  是电离能,  $U_p$  为有质动力势). 目前, 人们已经提出了各

收稿日期: 2016-11-15

基金项目: 国家自然科学基金(11504151); 辽宁省博士启动基金(201501123); 辽宁省教育厅基金(L2014242, JL201615405)

作者简介: 刘航(1985-), 女, 辽宁沈阳人, 博士, 讲师.

通讯作者: 冯立强, E-mails: lqfeng1101@126.com; lqfeng@dicp.ac.cn

种扩展高次谐波截止能量来获得更宽的超连续谱的方法. 例如: 电离、偏振门技术<sup>[6,7]</sup>; 量子路径调控方案<sup>[8]</sup>; 多色场方案<sup>[9,10]</sup>; 啁啾场方案<sup>[11]</sup>等.

虽然谐波截止能量在上述方案中可以得到有效延伸, 但是谐波强度在谐波截止能量附近会出现明显下降, 这并不利于高强度阿秒脉冲的输出. 因此, 如何在保证谐波强度足够强的同时来延伸谐波截止能量成为了人们关注的重点. 例如: Feng 等<sup>[12]</sup>利用 He<sup>+</sup> 离子叠加态作为初始态在双色激光场以及啁啾激光场作用下获得了一系列强度被增强 6 个数量级的阿秒脉冲. Ishikawa<sup>[13]</sup>, Feng 等<sup>[14]</sup>利用超快紫外光源激发 He 原子以及 He<sup>+</sup> 离子, 获得了一系列谐波增强范围在 7 个数量级到 17 个数量级的谐波光谱.

本文提出一种利用 He<sup>+</sup> 离子链模型来增强谐波强度以及延伸谐波截止能量的方案. 并结合电离几率, 谐波辐射时频分析图, 含时电子波包运动给出了谐波强度增强以及截止能量延伸的物理机制.

## 2 计算方法

He<sup>+</sup> 离子链与激光场相互作用可以通过数值求解含时薛定谔方程来描述<sup>[15]</sup>

$$i \frac{\partial \varphi(x, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, R) - xE(t) \right] \varphi(x, t) \quad (1)$$

其中  $V(x, R) = \sum_{n=-N}^{n=N} -2 / \sqrt{0.5 + (x + nR)^2}$  是 He<sup>+</sup> 离子链的势函数<sup>[16]</sup>,  $R$  是不同 He<sup>+</sup> 离子的核间距离,  $2N+1$  为 He<sup>+</sup> 离子个数,  $\varphi(x, t)$  为电子波函数. 激光场为  $E(t) = E \exp[-4 \ln(2) t^2 / \tau^2] \sin(\omega_1 t)$ , 式中  $E$ ,  $\omega_1$ ,  $\tau$  分别为激光场的振幅, 频率, 脉宽. 高次谐波可以表示为:  $H(\omega_1) = \left| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{T_{\text{total}}} a(t) e^{-i\omega_1 t} dt \right|^2$ , 其中  $a(t)$  为偶极加速度可以表示为<sup>[17]</sup>  $a(t) = \left\langle \varphi(x, t) \left| -\frac{\partial V(x, R)}{\partial x} + E(t) \right| \varphi(x, t) \right\rangle$ .

## 3 结果与讨论

图 1 给出强激光场与单个 He<sup>+</sup> 离子以及不同 He<sup>+</sup> 离子链作用下辐射谐波谱图. 激光场为 5 fs/800 nm,  $I = 5.0 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ . 由图可知, 在 He<sup>+</sup> 离子链模型下, 谐波辐射强度与单个 He<sup>+</sup> 离子相

比有明显增强. 具体来说: (i) 随着 He<sup>+</sup> 离子个数  $N$  增多, 谐波截止能量和谐波强度会逐渐延伸和增强(例如: 当  $N=7.0, R=3.0 \text{ a. u.}$  时, 谐波强度比单个 He<sup>+</sup> 离子时增强 6 个数量级); (ii) 随着核间距离  $R$  增大, 谐波截止能量和谐波强度会逐渐减小和减弱(例如: 当  $N=7.0, R=7.0 \text{ a. u.}$  时, 谐波强度只比单个 He<sup>+</sup> 离子时增强 2 个数量级).

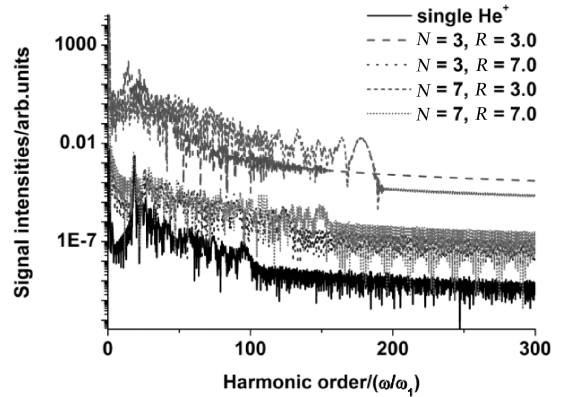


图 1 单个 He<sup>+</sup> 离子及 He<sup>+</sup> 离子链辐射高次谐波谱图. 激光场为 5 fs/800 nm,  $I = 5.0 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$

Fig. 1 High-order harmonic generation spectra of the single He<sup>+</sup> ion and the He<sup>+</sup> ion chain. The laser field is 5 fs/800 nm,  $I = 5.0 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$

研究表明谐波辐射强度与电离几率有关<sup>[18]</sup>. 因此, 图 2(a)和 2(b)给出激光光包络图及单个 He<sup>+</sup> 离子和 He<sup>+</sup> 离子链的电离几率. 由图可知, 电离主要发生在激光瞬时振幅附近, 即,  $t_1 = -0.75 \text{ T}$ ;  $t_2 = -0.25 \text{ T}$ ;  $t_3 = 0.25 \text{ T}$ ;  $t_4 = 0.75 \text{ T}$ . 随着 He<sup>+</sup> 离子个数增多, 电离几率增大; 但随着核间距离增大, 电离几率又减小, 因此导致图 1 所示谐波强度增强及变化.

图 3 给出单个 He<sup>+</sup> 离子及 He<sup>+</sup> 离子链的势能函数. 由图可知, (i) 随着 He<sup>+</sup> 离子个数增多, 体系的电离能增大; 但随着核间距离增大, 体系的电离能又减小. 由三步模型可知, 谐波截止能量  $E_{\text{cutoff}} = I_p + 3.17 U_p$  与体系电离能有关, 因此当体系 He<sup>+</sup> 离子个数增多时, 谐波截止能量得到延伸; 而当体系核间距离增大时, 谐波截止能量又减小. (ii) 随着 He<sup>+</sup> 离子个数增多, 体系势阱增多, 这样电离电子不仅可以和原母核发生回碰, 还可以与其它相邻母核发生回碰辐射谐波, 因此导致总谐波辐射几率增大, 但随着核间距离增大, 电子与邻近母核发生回碰的几率会减小. 因此导致总谐波辐射几率减小. 这就是图 1 所示谐波辐射强度增强及改变的根本原因.

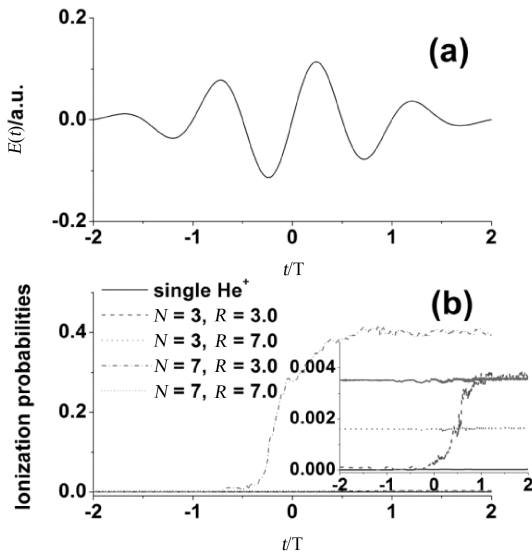


图 2 (a) 5 fs/800 nm 激光包络图, (b) 单个 He<sup>+</sup> 离子及 He<sup>+</sup> 离子链的电离几率, T 是 800 nm 场的光学周期

Fig. 2 (a) Laser profile of the 5 fs/800 nm field, (b) ionization probabilities of the single He<sup>+</sup> ion and the He<sup>+</sup> ion chain, T means the optical cycle of the 800 nm field

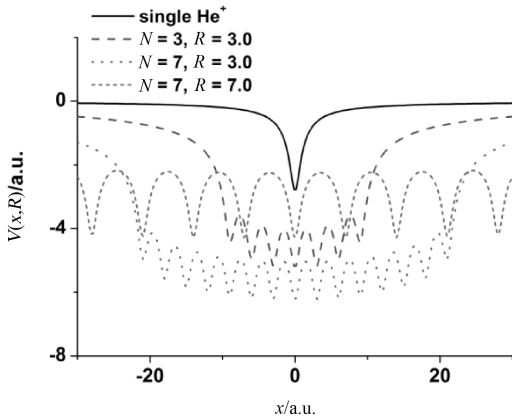


图 3 单个 He<sup>+</sup> 离子及 He<sup>+</sup> 离子链的势能函数

Fig. 3 Coulomb potentials of the single He<sup>+</sup> ion and the He<sup>+</sup> ion chain

图 4(a)~4(d) 分别给出单独 He<sup>+</sup> 离子及 He<sup>+</sup> 离子链在  $N=3, R=3.0$  a. u.、 $N=7, R=3.0$  a. u.、 $N=7, R=7.0$  a. u. 时谐波辐射的时频分析图<sup>[19]</sup>. 对于单独 He<sup>+</sup> 离子情况(图 4(a)), 谐波发射主要呈现 4 个回碰能量峰( $P_1 \sim P_4$ ). 对于  $N=3, R=3.0$  a. u. (图 4(b)) 和  $N=7, R=3.0$  a. u. (图 4(c)) 的 He<sup>+</sup> 离子链模型, 由于体系电离能增大, 每个回碰能量峰的截止能量与单独 He<sup>+</sup> 离子模型相比都有增大; 并且由于电子回碰几率随着 He<sup>+</sup> 离子个数增多而增大, 谐波辐射过程  $P_3$  和  $P_4$  的强度与单

独 He<sup>+</sup> 离子模型相比逐渐增强, 因此导致图 1 所示总谐波光谱辐射强度增强. 对于  $N=7, R=7.0$  a. u. (图 4(d)) 的 He<sup>+</sup> 离子链模型, 由于 He<sup>+</sup> 离子核间距的增大导致电子与母核回碰几率下降, 因此谐波辐射过程  $P_3$  和  $P_4$  的强度与小核间距情况 ( $N=7, R=3.0$  a. u.) 相比有减小, 但仍然大于单独 He<sup>+</sup> 离子模型的情况.

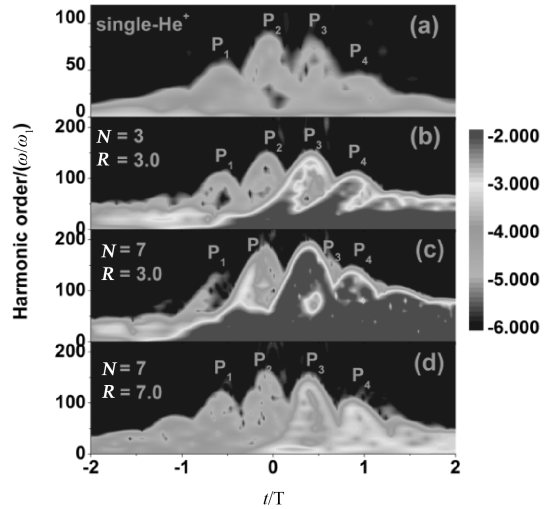


图 4 谐波发射的时间-频率分析图

(a) 单独 He<sup>+</sup>; (b)  $N=3, R=3.0$  a. u.; (c)  $N=7, R=3.0$  a. u.; (d)  $N=7, R=7.0$  a. u.

Fig. 4 Time-frequency analyses of harmonic spectra for the cases of (a) single He<sup>+</sup>; (b)  $N=3, R=3.0$  a. u.; (c)  $N=7, R=3.0$  a. u.; (d)  $N=7, R=7.0$  a. u.

为了更好地了解谐波辐射过程及电子运动规律, 图 5(a)~5(d) 分别给出单独 He<sup>+</sup> 离子及 He<sup>+</sup> 离子链的含时电子波包演化图. 由图可知, (i) 电子在  $t=-0.75T$  时沿正向电离, 随后电子在  $t=0.25T$  时返回核子辐射谐波, 即谐波辐射过程  $P_2$ . (ii) 电子在  $t=0.25T$  时沿负向电离, 随后部分电子在  $t=0.75T$  时返回核子辐射谐波, 即谐波辐射过程  $P_3$ . 但仍有部分高能电子在激光反向时并未返回母核而是电离出去了. (iii) 电子在  $t=0.75T$  时再次沿正向电离, 随后部分电子在  $t=1.25T$  激光反向时返回核子辐射谐波, 即谐波辐射过程  $P_4$ ; 而另一部分电子直接电离. 随着 He<sup>+</sup> 离子个数增多(比较图 5(a)~5(c)), 电子电离回碰过程的几率增大; 但随着核间距离增大(比较图 5(c) 和 5(d)), 电子运动几率再一次减小, 与图 4 谐波辐射时频分析结果一致.

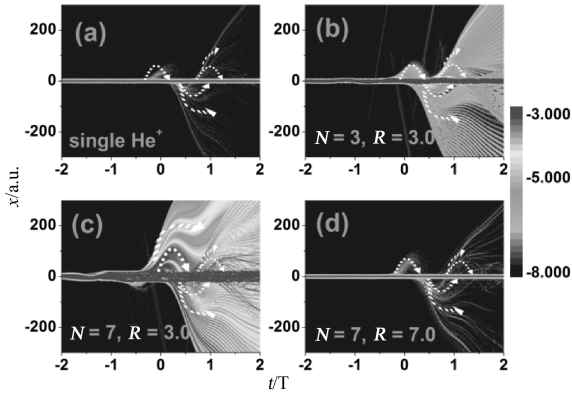


图 5 含时电子波包演化图

(a) 单独  $\text{He}^+$ ; (b)  $N=3, R=3.0$  a. u.; (c)  $N=7, R=3.0$  a. u.; (d)  $N=7, R=7.0$  a. u.

Fig. 5 Time-dependent wave functions for the cases of (a) single  $\text{He}^+$ ; (b)  $N=3, R=3.0$  a. u.; (c)  $N=7, R=3.0$  a. u.; (d)  $N=7, R=7.0$  a. u.

## 4 结 论

综上所述,本文提出一种利用  $\text{He}^+$  离子链模型来增强谐波强度以及延伸谐波截止能量的方案. 结果表明,随着  $\text{He}^+$  离子个数增多,谐波截止能量和谐波强度会逐渐延伸和增强;(ii) 随着核间距离增大,谐波截止能量和谐波强度会逐渐减小和减弱. 随后,结合电离几率,谐波辐射时频分析图,含时电子波包演化图给出了谐波强度增强以及截止能量延伸的物理机制.

### 参考文献:

- [1] Krausz F, Ivanov M. Attosecond physics [J]. Rev Mod Phys, 2009, 81: 163.
- [2] Uiberacker M, Uphues T, Schultze M, *et al.* Attosecond real-time observation of electron tunnelling in atoms [J]. Nature, 2007, 446: 627.
- [3] Goulielmakis E, Schultze M, Hofstetter M, *et al.* Single-cycle nonlinear optics [J]. Science, 2008, 320: 1614.
- [4] 葛鑫磊, 王群. 少周期非均匀场下原子空间位置对高次谐波发射的影响[J]. 原子与分子物理学报, 2017, 34: 108.
- [5] Corkum P B. Plasma perspective on strong field multiphoton ionization [J]. Phys Rev Lett, 1993, 71: 1994.
- [6] Sansone G, Benedetti E, Calegari F, *et al.* Isolated single-cycle attosecond pulses [J]. Science, 2006, 314: 443.

- [7] 何文娜, 王国利, 周效信. 极化门控制下中红外激光场驱动 He 原子产生的单个阿秒脉冲[J]. 原子与分子物理学报, 2015, 32: 437.
- [8] 李娜娜, 葛鑫磊, 刘学深. 圆偏振激光附加太赫兹场作用下的高次谐波发射和孤立阿秒脉冲的产生 [J]. 原子与分子物理学报, 2016, 33: 105.
- [9] Lu R F, He H X, Guo Y H, *et al.* Theoretical study of single attosecond pulse generation with a three-colour laser field [J]. J Phys B: At Mol Opt, 2009, 42: 225601.
- [10] Li P C, Zhou X X, Wang G L, *et al.* Isolated sub-30-as pulse generation of an  $\text{He}^+$  ion by an intense few-cycle chirped laser and its high-order harmonic pulses [J]. Phys Rev A, 2009, 80: 053825.
- [11] Feng L Q, Chu T S. Generation of an isolated sub-40-as pulse using two-color laser pulses: combined chirp effects [J]. Phys Rev A, 2011, 84: 053853.
- [12] Feng L Q, Chu T S. Intensity improvement in the attosecond pulse generation with the coherent superposition initial state [J]. Phys Lett A, 2012, 376: 1523.
- [13] Ishikawa K. Photoemission and ionization of  $\text{He}^+$  under simultaneous irradiation of fundamental laser and high-order harmonic pulses [J]. Phys Rev Lett, 2003, 91: 043002.
- [14] Feng L Q, Chu T S. Intensity enhancement in attosecond pulse generation [J]. IEEE J Quantum Electron, 2012, 48: 1462.
- [15] Lu R F, Zhang P Y, Han K L. Attosecond-resolution quantum dynamics calculations for atoms and molecules in strong laser fields [J]. Phys Rev E, 2008, 77: 066701.
- [16] Numico R, Giulietti D, Giulietti A, *et al.* High-order harmonic generation from a linear chain of ions [J]. J Phys B: At Mol Opt, 2000, 33: 2605.
- [17] Burnett K, Reed V C, Cooper J, *et al.* Calculation of the background emitted during high-harmonic generation [J]. Phys Rev A, 1992, 45: 3347.
- [18] Mohebbi M, Batebi S. Two states hydrogenlike model for high-order harmonic generation and an isolated attosecond pulse generation in a  $\text{He}^+$  ion [J]. Opt Commun, 2013, 296: 113.
- [19] Antoine P, Piraux B, Maquet A. Time profile of harmonics generated by a single atom in a strong electromagnetic field [J]. Phys Rev A, 1995, 51: R1750.