

# 应用辛算法计算强激光场中的一维模型氢原子<sup>y</sup>

刘晓艳, 刘学深, 杨玉军, 丁培柱

(吉林大学原子与分子物理研究所, 吉林 长春 130023)

摘要: 采用辛算法计算并讨论了氢原子在不同峰值强度或不同脉宽下的谐波谱.

关键词: 激光与原子相互作用; 谐波谱; 束缚态几率

中图分类号: O562 文献标识码: A

## 1 引言

近 20 年来, 激光技术尤其短脉冲强激光技术获得飞速发展, 使得激光与原子相互作用的研究成为物理学中极为活跃的前沿研究课题. 本文应用第一类渐近边界条件, 将强激光场中一维氢原子含时薛定格方程的无穷空间初值问题转化为有界空间初边值问题, 再采用对称差商代替偏导数离散成“非齐线性正则方程”, 应用“非齐线性正则方程”的辛算法计算了电离几率与高次谐波, 讨论了入射激光的脉宽和激光场强度改变时, 束缚态几率和高次谐波的变化. 计算结果显示, 激光场强度有一个“饱和值”, 在饱和值之前, 算得的截止位置与按截止规则计算的值相符; 超过饱和值, 算得的截止位置不符合截止规则, 谐波平台越来越倾斜. 计算结果还显示, 入射激光脉冲的脉宽太小时, 截止位置不符合截止规则. 这些结果可能为强激光与原子相互作用的研究提供有益的启示.

## 2 强激光与氢原子相互作用的辛算法

强激光场中一维氢原子的状态由含时薛定格方程的无穷空间初值问题

$$i \frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t) = \left| -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - \mathcal{E}(t)x \right| \phi(x, t),$$

$$(-\infty < x < \infty, 0 \leq t \leq T) \quad (1)$$

$$\phi(0, x) = \Phi(x), \quad (-\infty < x < \infty) \quad (2)$$

描述. 其中原子势取软核势模型<sup>[1]</sup>,  $V(x) = -1/\sqrt{x^2+2}$ ,  $\mathcal{E}(t)x = f(t)E_0x \sin(\omega_0 t)$ ,  $E_0$  是激光场强度的峰值, 激光脉冲外形  $f(t) = \sin^2 \omega t$ ; 初态  $\Phi(x) = Q(1 + \sqrt{x^2+2}) \exp(-\sqrt{x^2+2})$  为基态波函数.

因为当  $|x|$  充分大时,  $|V(x)| \ll |-\mathcal{E}(t)x|$ , 略去  $V(x)$  采用 Fourier 变换方法求得 (1) 和 (2) 式的解为  $\phi^W(x, t)$ , 当  $|x|$  充分大时,  $\phi^W(x, t)$  渐近 (1), (2) 式的解  $\phi(x, t)$ <sup>[2]</sup>, 对  $X \gg 0$ , 应用相积分法可得

$$\phi^W(\pm X, t) = \exp(i\mathcal{E}AX - iq/2) \cdot \Phi(\pm X - \alpha),$$

其中  $\alpha(t) = -\int_0^t A(t') dt'$ ,  $q(t) = \int_0^t A^2(t') dt'$ ,

$$\frac{\partial A(t)}{\partial t} = -\mathcal{E}(t), \quad A(0) = 0.$$

无穷空间初值问题 (1) 和 (2) 式转化为有界初边值问题

$$i \frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t) = \left| -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) - \mathcal{E}(t)x \right| \phi(x, t),$$

$$(-X < x < X, t > 0) \quad (3)$$

$$\phi(x, t) \Big|_{x=\pm X} = \Phi(\pm X, t)$$

$$= \exp(-iA(\pm X) - i\frac{q}{2}) \Phi(\pm X - \alpha), \quad (t > 0) \quad (4)$$

$$\phi(x, 0) = \Phi(x), \quad (-X < x < X) \quad (5)$$

$$\text{设 } \phi(x, t) = a(x, t) + ib(x, t), \quad \phi(x, t) =$$

<sup>y</sup> 收稿日期: 2002 - 03 - 05; 修改日期: 2002 - 06 - 12

\* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(19771041, 10074019, 19874025); 国家重点基础研究专项经费资助项目(G1999032804)

作者简介: 刘晓艳(1971-), 女(蒙族), 辽宁省建平县人, 副教授, 主要从事微观哈密顿系统的保结构算法与应用.

$c(x, t) + id(x, t)$ . 取时间步长  $\tau > 0$ . 空间步长  $h = X/N$ ,  $N$  为充分大整数. 记

$$\begin{aligned} t_k &= k\tau, \quad k = 0, 1, 2, \dots; \quad x_j = jh, \\ j &= -N, -N+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, N-1, N; \\ g_j &= g(x_j), \quad f_j(t) = f(x_j, t); \quad f_j^k = f(x_j, t_k); \end{aligned}$$

$2N-1$  维向量

$$\begin{aligned} A(t) &= (a_{-N+1}(t), \dots, a_{N-1}(t))^T, \\ B(t) &= (b_{-N+1}(t), \dots, b_{N-1}(t))^T, \\ C(t) &= (c_{-N}(t), 0, \dots, 0, c_N(t))^T, \\ D(t) &= (d_{-N}(t), 0, \dots, 0, d_{N-1}(t))^T; \end{aligned}$$

$4N-2$  维向量

$$Z(t) = (A(t)^T B(t)^T)^T,$$

$$U = -\frac{1}{2h^2} \begin{vmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \Lambda & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \Lambda & 0 \\ 0 & & 0 & & & M \\ M & & & 0 & & 0 \\ 0 & \Lambda & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & \Lambda & 0 & 0 & 1 & -2 \end{vmatrix}, \quad V = \begin{vmatrix} V_{-N+1+} & E_{-N+1}(t)x_{-N+1} & & 0 \\ & & O & \\ & 0 & & V_{N-1+} E_{N-1}(t)x_{N-1} \end{vmatrix}, \quad (8)$$

$G$  是无穷小矩阵, 它的齐方程的通解和非齐方程的特解都由辛变换生成, 文献[3]采用按模方守恒的 2 阶显式辛格式和梯形求积公式计算齐方程的通解和非齐方程的特解, 即可得到(6)式的辛算法并计算出波函数在各个节点  $(x_j, t_k)$  上的值.

### 3 强激光场中一维氢原子的束缚态几率和高次谐波

高次谐波的强度正比于  $|d(\omega)|^2 = |1/(T_2 - T_1) \int_{T_1}^{T_2} d(t) e^{-i\omega t} dt|^2$ , 其中  $d(\omega)$  是电偶极矩  $d(t) = \langle \psi(x, t) | \hat{d} | \psi(x, t) \rangle$  的 Fourier 变换, 算子  $\hat{d}$  有三种形式, 本文采用加速度形式,

$$d(t) = \langle \psi(x, t) | \frac{\partial}{\partial x} (V(x) - E_0 x f(t) \sin \omega t) | \psi(x, t) \rangle. \quad (9)$$

采用辛-打靶法<sup>[4]</sup>可求得无激光场时一维氢原子的

$$Y(t) = (C(t)^T D(t)^T)^T.$$

在含时薛定格方程(3)中用对称差商

$$\frac{\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}}{h^2} \text{ 代替偏导数 } \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x_j, t), \text{ 方程 (3), (4) 离散成}$$

$$\frac{d}{dt} Z = GZ - \frac{1}{2h^2} JY, \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \text{其中 } G &= \begin{vmatrix} 0 & S \\ -S & 0 \end{vmatrix} = JH, \quad J = \begin{vmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{vmatrix}, \\ H &= \begin{vmatrix} S & 0 \\ 0 & S \end{vmatrix}, \end{aligned} \quad (7)$$

$I$  和  $0$  分别是  $2N-1$  阶单位矩阵和零矩阵,  $2N-1$  阶矩阵  $S = U+V$ ,

分立态  $\phi_1, \phi_2, L$ . 于是在激光场作用下一维氢原子的束缚态几率<sup>[5]</sup>  $P_b(t) = \sum |\alpha_i(t)|^2$ , 其中束缚态  $\phi_i$  的布居几率

$$\alpha_i(t) = \int_X \psi(x, t) \phi_i(x) dx, \quad i = 1, 2, L. \quad (10)$$

将采用辛算法算得的波函数代入  $d(t)$  和  $\alpha_i(t)$  中即可计算谐波谱  $|d(\omega)|^2$  和束缚态几率  $P_b(t)$ .

### 4 计算结果与分析

取时间步长  $\tau = 0.001$ , 边界  $X = 300$ , 空间步长  $h = 0.05$ . 图 1 和图 2 是场强峰值为 0.08 和 0.15, 脉宽为 5 fs, 激光频率  $\omega_0 = 0.055$  的谐波谱. 从图 1 可以看出, 当  $E_0 = 0.08$  时截止位置在 40 附近, 与截止规则计算的值 39.6 相符, 当  $E_0 = 0.15$  时的截止位置在 86 附近与截止规则计算的值 116.2 不相符; 平台区有明显的倾斜, 即各次谐波的强度差别较大. 计算更多的场强峰值后可以发现<sup>[6]</sup>, 产生高

次谐波的激光场强度有一个饱和值, 在达到饱和值之前, 谐波谱符合截止规则, 平台区几乎没有倾斜; 超过这个值以后, 谐波谱不符合截止规则, 平台区由高向低倾斜.

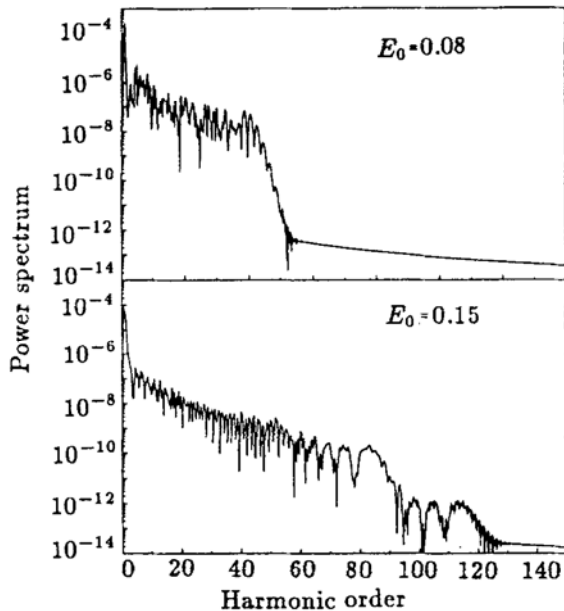


图 1 场强峰值是 0.08, 0.15 时的谐波谱

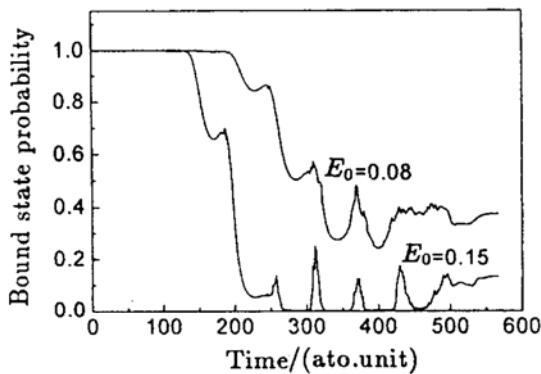


图 2 当场强峰值为 0.08, 0.15 时束缚态的几率随时间的演化

图 2 是算得的一维氢原子的束缚态几率. 可以看出<sup>[6]</sup>, 谐波谱和束缚态几率有密切的关系; 激光场强度超过某一数值时, 束缚态几率很快下降接近于零. 致使谐波谱与截止规则不符, 平台明显倾斜 (见图 1).

图 3 是在脉宽 2fs 和场强峰值 0.08 其它条件同上时的谐波谱, 可以看出, 算得的截止位置与截止规则不符, 这可能是多色场效应引起的. 事实上,

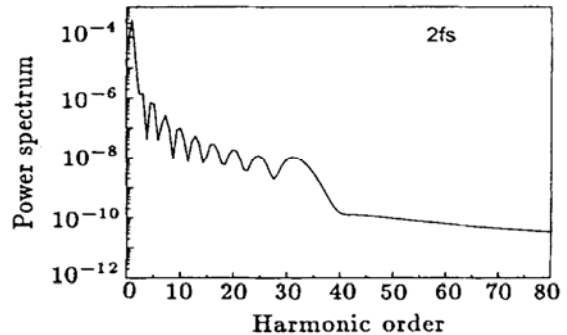


图 3 当脉宽为 2 fs, 场强值为 0.08 时的谐波谱

$$f(t) \sin \omega_0 t = \sin^2 \omega t \sin \omega_0 t = \sin \omega_0 t - \frac{1}{4} \sin(\omega_0 + 2\omega)t - \frac{1}{4} \sin(\omega_0 - 2\omega)t, \quad (11)$$

从上式可以看出, 当  $\omega$  比  $\omega_0$  小得很多时, 多色场效应不明显. 但当  $\omega$  增大到与  $\omega_0$  接近时, 激光成为频率为  $\omega_0$  与  $3\omega_0$  的双色场, 单色场截止规则不适用了, 应该用适合多色场的截止规则.

参 考 文 献:

[1] Liu W C, Clark C W. Closed-form Solution of the Schrödinger Equation for a Model One-dimensional Hydrogen Atom[J]. J Phys, 1992, **B25**: L517.

[2] 刘晓艳, 刘学深, 周忠源等. 1 维强场模型研究中的非齐线性正则方程的辛算法[J]. 计算物理, 2002, **19**(1): 62.

[3] Zhou Z Y, Ding P Z. Conservation Quantities of the Explicit Symplectic Scheme for Time-evolution of Quantum System[J], Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics, 1997, **14**(2): 175.

[4] Liu Xueshen, Liu Xiaoyan, Zhou Zhongyuan, et al. Numerical Solution of One-dimensional Time-independent Schrödinger Equation by Using Symplectic Schemes[J]. Intern J Quantum Chem, 2000, **79**: 6343.

[5] 周忠源, 朱硕人, 丁培柱等. 激光场中 H 原子多光子电离速率[J]. 强激光与粒子束, 2000, **12**(2): 169.

[6] 刘晓艳. 强激光与原子相互作用的保结构算法[D]. 长春: 吉林大学原子与分子物理研究所, 2001.

# Calculation by Using Symplectic Method for One-dimensional H in Intense Laser Field \*

LIU Xiaoyan, LIU Xueshen, YANG Yurjun, DING Peizhu

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

**Abstract:** The time-dependent Schrödinger equation with boundary condition for one-dimensional hydrogen atom in intense laser field can be transformed into inhomogeneous canonic equations by substituting symmetric difference quotient for partial derivative. The general solutions of the inhomogeneous canonic equations and the particular solutions of the corresponding homogeneous canonic equations are both generated by symplectic transformation. Therefore the symplectic method can be used to compute them. Moreover the high-order harmonics and its corresponding bound probability of the one-dimensional hydrogen atom in the laser field are discussed when the laser pulse or the intensity is changed. The results that we obtained are in agreement with other theoretical results.

**Key words:** high-order harmonics spectrum; bound probability; symplectic method

---

\* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China(19771041, 10074019, 19874025); Special Funds for Major State Basic Research Project(G1999032804)