亮点

从材料应变到光子辐射: 解析晶体内部电子结构新方法

何峰^{*}

上海交通大学物理与天文学院, 上海 201800

^{*}联系人, E-mail: fhe@sjtu.edu.cn

收稿日期: 2020-02-25; 接受日期: 2020-03-02; 网络出版日期: 2020-04-17

国家自然科学基金(编号: 11925405)资助项目

摘要 超短强激光脉冲作用于晶体材料可驱动若干非线性光学过程, 例如高次谐波辐射. 理论研究发现, 对材料进行应变调控, 谐波频谱的效率和奇偶次特性随之被调制. 由于高次谐波辐射频谱携带着靶材结构和电子动力学信息, 笔者认为固体谐波将成为解析晶体内部电子结构的新方法.

关键词 应变, 高次谐波, 相干, 能带结构

PACS: 62.20.-x, 42.79.Nv, 42.25.Hz, 71.20.-b

晶体的应变会改变其微观周期结构, 这一改变可以体现在晶体的非线性光学特性上. 反之, 通过探测强激光作用下晶体的非线性光学效应, 可以反推晶体内部结构. 晶体在强激光作用下的典型非线性过程之一为高次谐波辐射.

高次谐波在过去的30年内获得了广泛的研究. 人们对高次谐波的研究始于强激光脉冲和原子的相互作用^[1]. 当原子置于强激光场中时, 价电子隧穿出库伦势, 并被激光场加速. 当激光场改变方向后, 光电子和原子核发生复合, 电子的能量转化为光子能量, 这就是高次谐波辐射. 高次谐波谱具有典型的结构: 较强的低级次谐波后跟着强度差不多的高次谐波(被称为高次谐波的平台), 谐波频率截止于 $3.17U_p + I_p$, 其中 U_p 是电子在激光场中的有质动能, I_p 是原子或者分子的电离能. 谐

波谱中一般只含有奇次谐波. 高次谐波可以用来合成阿秒激光脉冲, 提取分子结构和价电子波函数的空间分布等信息, 因此成为国内外超快激光物理的研究热点.

人们对气体分子的高次谐波辐射已经获得了广泛而深刻的认识, 但直到近年来才开始研究激光作用下固体内高次谐波的辐射^[2,3]. 最近, 南京理工大学的研究团队, 通过求解单层氮化铝的多能带半导体布洛赫方程, 数值模拟研究了强激光和单层氮化铝相互作用产生高次谐波辐射的过程^[4]. 单层氮化铝的氮和铝原子构成正六边形结构, 如图1(a)所示; 其倒格子空间的第一布里渊区如图1(b)所示. 通过对单层氮化铝施加双轴应变, 该团队揭示了强激光作用下单层氮化铝产生的新奇谐波频谱分布, 如图1(c)–(f)所示, 图中竖线

引用格式: 何峰. 从材料应变到光子辐射: 解析晶体内部电子结构新方法. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2020, 50: 087331

He F. From strain engineering of material to photon radiation: a new perspective for investigating crystal microstructure and electronic structure (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2020, 50: 087331, doi: 10.1360/SSPMA-2020-0050

图 1 (网络版彩图)单层AlN的实空间结构 (a), 倒空间第一布里渊区 (b)以及谐波辐射谱 (c)–(f)^[4]

Figure 1 (Color online) (a) Geometric structure in real space, (b) first Brillouin zone in reciprocal space, and (c)–(f) harmonic spectra of monolayer AlN [4].

表示的是谐波谱两个平台区的截止区. 研究还发现, 当施加15%的应变后, 氮化铝晶体的导带能量大约降低 2 eV, 因此电子可以吸收更少的光子更加容易地在价带和导带之间发生跃迁, 高次谐波谱第一个平台区的辐射效率获得显著提升. 另外, 应变能打开更多跃迁通道: 除了远离最小带隙的价带到导带之间发生直接跃迁, 电子还可以经由其他能带发生多步非直接跃迁, 形成第二个谐波平台区. 这些通道的相互干涉在第二个谐波平台区产生偶次谐波辐射. 利用高次谐波辐射

谱和应变之间的对应关系, 人们可以解析材料几何结构和电子结构. 作者在多能带半导体布洛赫方程模型的基础上, 采用跃迁偶极矩分析, 从靶材物性调控出发探究了高次谐波及潜在应用.

随着激光技术的进步, 激光的多项参数(波长, 偏振, 强度和脉宽等)可以精确调控, 这为固体高次谐波辐射提供了便利. 人们将固体高次谐波技术和材料生长技术、低温技术等结合起来, 有望揭示凝聚态体系中更多有趣的物理过程.

参考文献

- 1 Krausz F, Ivanov M. Attosecond physics. *Rev Mod Phys*, 2009, 81: 163–234
- 2 Ghimire S, Dichiara A D, Sistrunk E, et al. Observation of high-order harmonic generation in a bulk crystal. *Nat Phys*, 2011, 7: 138–141
- 3 Kruchinin S Y, Krausz F, Yakovlev V S. *Colloquium*: Strong-field phenomena in periodic systems. *Rev Mod Phys*, 2018, 90: 021002, arXiv: 1712.05685
- 4 Wang Z W, Jiang S C, Yuan G L, et al. Strain effect on the orientation-dependent harmonic spectrum of monolayer aluminum nitride. *Sci China-Phys Mech Astron*, 2020, 63: 257311

From strain engineering of material to photon radiation: a new perspective for investigating crystal microstructure and electronic structure

HE Feng^{*}

School of Physics and Astronomy, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 201800, China

Many nonlinear optical scenarios, including the typical high-order harmonic radiation, can be initiated in crystals exposed to ultrashort strong lasers. According to the recent theoretical calculation, the high-order harmonic radiation can be modulated by exerting the strain on a monolayer aluminum nitride. Since the high-order harmonic spectra carry the structural information of the target, inversely, the radiated spectra can be used to extract the microstructure of the target and even the ultrafast electron dynamics.

strain, high-order harmonics, interference, band structure

PACS: 62.20.-x, 42.79.Nv, 42.25.Hz, 71.20.-b

doi: [10.1360/SSPMA-2020-0050](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2020-0050)