

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Национальный исследовательский Нижегородский  
государственный университет им. Н. И. Лобачевского**

**РЕДУЦИРОВАННЫЕ ПОДХОДЫ  
К КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ  
ИОНИЗАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В СИЛЬНЫХ ПОЛЯХ**

Учебно-методическое пособие

Рекомендовано методической комиссией радиофизического факультета для аспирантов ННГУ, обучающихся по направлению подготовки 03.06.01 – «Физика и астрономия», и для магистрантов ННГУ, обучающихся по направлению подготовки 03.04.03 – «Радиофизика»

Нижний Новгород  
2021

УДК 004.94  
ББК 22.193  
Р33

**Р33 РЕДУЦИРОВАННЫЕ ПОДХОДЫ К КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ ИОНИЗАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В СИЛЬНЫХ ПОЛЯХ:** Учебно-методическое пособие. Авторы: Введенский Н. В., Романов А. А., Рябикин М. Ю., Силаев А. А. — Н.Новгород: Издательство Нижегородского госуниверситета, 2021. — 37 с.

Рецензент: к.ф.-м.н. **М. Ю. Емелин**

В данном учебно-методическом пособии рассматриваются алгоритмы решения трёхмерного нестационарного уравнения Шрёдингера в сферической и цилиндрической системах координат и методы построения одномерных и двумерных модельных потенциалов, симулирующих потенциал ионного остова атома и используемых для быстрых расчётов процессов ионизации атомов и генерации электронных токов на основе решения нестационарного уравнения Шрёдингера.

Пособие предназначено для магистрантов и аспирантов, специализирующихся в области численного моделирования взаимодействия интенсивных электромагнитных полей с ионизируемыми средами.

Ответственный за выпуск:  
заместитель председателя методической комиссии радиофизического факультета ННГУ, д.ф.-м.н., профессор **Е. З. Грибова**

УДК 004.94  
ББК 22.193

© **Н. В. Введенский, А. А. Романов, М. Ю. Рябикин, А. А. Силаев**  
© **Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского, 2021**

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>1. Введение</b>	<b>4</b>
<b>2. Приближения и уравнения</b>	<b>7</b>
<b>3. Алгоритмы быстрого решения трёхмерного нестационарного уравнения Шрёдингера</b>	<b>10</b>
3.1. Разложение по сферическим гармоникам . . . . .	10
3.2. Решение в цилиндрической системе координат . . . . .	12
<b>4. Модельные потенциалы пониженной размерности</b>	<b>14</b>
4.1. Одномерные модельные потенциалы . . . . .	14
4.2. Двумерные модельные потенциалы . . . . .	17
<b>5. Примеры численных расчётов</b>	<b>19</b>
5.1. Метод расчёта . . . . .	19
5.2. Высокочастотная часть спектра электронного тока . . . . .	20
5.3. Остаточная плотность тока свободных электронов . . . . .	21
<b>6. Амплитуды рекомбинации и вероятности квазистатической ионизации</b>	<b>24</b>
<b>7. Обсуждение результатов численных расчётов</b>	<b>28</b>
<b>8. Заключение</b>	<b>30</b>
<b>Список литературы</b>	<b>31</b>

# 1. Введение

Одной из важных проблем теоретического описания взаимодействия сильных лазерных полей с ионизируемой средой является расчёт электронных токов, возбуждаемых в процессе этого взаимодействия. Такой расчёт важен, в частности, для описания хорошо известного явления генерации высоких гармоник оптического излучения [1—4]. Расчёт электронных токов важен также и для описания другого широко исследуемого в последнее время явления — генерации когерентного терагерцового излучения при ионизации газа короткими лазерными импульсами [5—8].

В случае генерации высоких гармоник (ГВГ) оптического излучения обычно рассчитывают высокочастотный спектр так называемого дипольного ускорения [9], которое пропорционально производной по времени от плотности электронного тока. Физическим механизмом, ведущим к появлению высоких частот в спектре дипольного ускорения, является рекомбинация электронов, движущихся в континууме под действием лазерного поля, при их возвратных соударениях с ионами [10, 11]. Высокочастотный спектр дипольного ускорения обладает широким интервалом с примерно одинаковыми интенсивностями гармоник (область плато), который заканчивается хорошо выраженной отсечкой в области частот, соответствующих экстремальному ультрафиолетовому или мягкому рентгеновскому излучению. Для случая предельно коротких лазерных импульсов, амплитуда поля в которых на соседних полупериодах значительно различается, спектральная селекция наиболее высоких гармоник, которые обладают фазовым синхронизмом, позволяет получать одиночные аттосекундные импульсы [12]. Большое значение для получения таких одиночных импульсов имеет стабилизация фазы огибающей короткого импульса относительно его заполнения [13].

В случае генерации излучения с частотой много меньшей лазерной, например, терагерцового излучения, ключевым моментом в теоретическом описании является отыскание остаточной плотности тока (ОПТ) свободных электронов, которая пропорциональна нулевой гармонике в спектре дипольного ускорения электрона. Эта ОПТ является начальным толчком к поляризации создаваемой плазмы и к возбуждению в ней излучающих собственных колебаний, частоты которых в широком диапазоне значений газовых давлений и плазменных плотностей лежат в терагерцовой полосе частот. Проведенные исследования, основанные как на полуклассических [6, 14—16], так и на *ab initio* ("из первых принципов") квантовомеханических [7, 17—20] расчётах, показали, что величина ОПТ зависит от фазы импульса (определяющей расстройку в положениях максимумов огибающей импульса и периодического поля на несущей частоте импульса), что может быть использовано для мониторинга фазы предельно коротких лазерных импульсов путём детектирования низкочастотных (терагерцовых) волн. При фиксированных остальных параметрах лазерного импульса

существует оптимальная фаза, при которой ОПТ максимальна. Величина ОПТ при оптимальной фазе экспоненциально возрастает с уменьшением длительности лазерного импульса, что при использовании очень коротких лазерных импульсов может приводить к очень высоким значениям эффективности оптико-терагерцовой конверсии [6, 7, 20].

Один из основных подходов к исследованию описанных выше и других ионизационно-стимулированных явлений основан на численном решении нестационарного уравнения Шрёдингера (УШ) для электронной волновой функции [21]. Основная сложность реализации этого подхода заключается в большом объёме вычислительных ресурсов, требуемых для численного решения трёхмерного УШ. Одним из способов повышения производительности расчётов является использование цилиндрической или сферической системы координат. В случае, когда лазерный импульс является линейно поляризованным, это позволяет эффективно снизить размерность уравнения (по сравнению с решением трёхмерного нестационарного УШ в декартовой системе координат) и добиться существенного ускорения расчётов. Другим способом повышения производительности расчётов является понижение размерности самой физической задачи. В этом случае кулоновское взаимодействие между заряженными частицами описывается с помощью одномерных или двумерных *модельных потенциалов*. Одномерные модельные потенциалы получили большое распространение для исследования различных явлений в сильных полях, включая надпороговую ионизацию [22, 23], генерацию высоких гармоник [24—26] и аттосекундных импульсов [3, 27], стабилизацию атома [28, 29], ускоренную ионизацию двухатомных молекул [30, 31], генерацию остаточных токов [19, 32]. Использование двумерных модельных потенциалов позволило провести широкие исследования в принципиально неоднородных задачах, связанных с описанием ионизационно-стимулированных явлений в полях произвольной поляризации [33, 34] или за рамками электродипольного приближения [3, 35, 36].

В связи с большим прогрессом в развитии компьютерной техники появляется большое количество работ, в которых в одноэлектронном приближении решается точное трёхмерное нестационарное УШ для описания ионизационно-стимулированных явлений. Есть также примеры решения точного нестационарного УШ для двухэлектронных систем, например, атома гелия [37]. Однако использование моделей пониженной размерности не утратило своей актуальности и по-прежнему является практически единственной возможностью для решения многих физических задач [23, 38—40]. В частности, модели пониженной размерности используются в современных работах при решении задач, требующих многократного решения нестационарного УШ. К их числу относится моделирование взаимодействия лазерных импульсов с твёрдыми телами на основе метода функционала плотности [39]; задачи, имеющие дело с пространственно-неоднородными полями, включая случаи совместного решения уравнений Шрёдингера и Максвелла [41]. Другой класс подобных задач относится к иссле-

дованию систем, обладающих большим числом степеней свободы. Примерами таких задач являются исследования диссоциативно-ионизационной динамики молекул [42, 43] и непоследовательных многоэлектронных процессов [40, 44—46]. Заметим, что низкоразмерные потенциалы используются также и в задачах, далеких от рассматриваемых здесь ионизационно-стимулированных явлений [47—49].

Целью данного учебно-методического пособия является рассмотрение алгоритмов быстрого решения трёхмерного нестационарного УШ в сферической и цилиндрической системах координат, а также обсуждение известных на настоящий момент моделей пониженной размерности для расчётов электронной плотности тока. В частности, рассматривается вопрос об оптимальном выборе низкоразмерных модельных потенциалов для расчётов спектров ГВГ и остаточной плотности тока в различных диапазонах параметров ионизирующих лазерных импульсов. Для этого в разделе 2 описывается процедура нахождения спектров ГВГ и остаточной плотности тока. В разделе 3 рассматриваются алгоритмы решения трёхмерного нестационарного УШ в сферической и цилиндрической системах координат для случая линейно-поляризованного лазерного поля. В разделе 4 представлены модельные потенциалы для атома водорода и атомов различных инертных газов. В разделе 5 приводятся примеры расчётов спектров ГВГ и остаточной плотности тока при различных значениях интенсивности, длительности и длины волны лазерных импульсов. В разделе 6 для качественного объяснения результатов численных расчётов проводится сравнение зависимостей вероятности туннельной ионизации в единицу времени от напряжённости поля для модельных низкоразмерных потенциалов и трёхмерного кулоновского потенциала. Также в этом разделе проводится сравнение амплитуд рекомбинации, вычисленных для различных одномерных и двумерных моделей, с соответствующими величинами, даваемыми полноразмерным моделированием. Обсуждения результатов численных расчётов представлены в разделе 7. В разделе 8 указаны области значений параметров лазерных импульсов, в которых достигается высокая точность расчётов остаточной плотности тока и спектров ГВГ при использовании различных модельных потенциалов.

## 2. Приближения и уравнения

Рассмотрим невозмущённый атом, помещённый в линейно поляризованное и направленное вдоль оси  $z$  электрическое поле  $E(t)$  лазерного импульса. Чтобы можно было пренебречь влиянием магнитного поля на электронную динамику ограничимся значениями лазерных интенсивностей  $I \sim 10^{13} - 10^{15}$  Вт/см<sup>2</sup> [50]. При этом справедливо так называемое электродипольное приближение для описания взаимодействия поля лазерного импульса с атомом [51]. В этом приближении нестационарное УШ для волновой функции  $\psi$  атомарного электрона в калибровке длины записывается следующим образом:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} + V(\mathbf{r}) - ezE(t) \right] \psi, \quad (1)$$

где  $\hbar$  — приведённая постоянная Планка,  $V(\mathbf{r})$  — электростатический потенциал, создаваемый родительским ионом, находящимся в точке  $\mathbf{r} = 0$ ,  $e = -|e|$  и  $m_e$  — заряд и масса электрона соответственно,  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$  есть оператор импульса,  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор электрона. В трёхмерной задаче оператор импульса и расстояние записываются как  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar(\mathbf{x}_0\partial/\partial x + \mathbf{y}_0\partial/\partial y + \mathbf{z}_0\partial/\partial z)$  и  $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ , в двумерной задаче — как  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar(\mathbf{x}_0\partial/\partial x + \mathbf{z}_0\partial/\partial z)$  и  $r = \sqrt{x^2 + z^2}$ , в одномерной задаче — как  $\hat{\mathbf{p}} = -\mathbf{z}_0i\hbar\partial/\partial z$  и  $r = |z|$ , где  $x, y, z$  — оси декартовой системы координат.

В результате воздействия электрического поля находящийся в атоме электрон приобретает зависящее от времени и направленное вдоль оси  $z$  дипольное ускорение, вычисляемое с использованием теоремы Эренфеста [9] как

$$a(t) = \frac{e}{m_e} E(t) - \frac{1}{m_e} \langle \psi | \frac{\partial V}{\partial z} | \psi \rangle \quad (2)$$

(здесь и далее считается, что электронная волновая функция нормирована на единицу, т.е.  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ ). Через дипольное ускорение можно выразить локальные макроскопические характеристики среды, в частности, плотность электронного тока, возбуждаемого в лазерной плазме. Компонента плотности тока вдоль оси  $z$ , которая по определению равна

$$j(t) = \frac{eN_g}{m_e} \langle \psi | \hat{p}_z | \psi \rangle, \quad (3)$$

связана с дипольным ускорением формулой

$$j(t) = eN_g \int_{-\infty}^t a(t') dt'. \quad (4)$$

Здесь  $N_g$  — невозмущенная плотность газа,  $\hat{p}_z = -i\hbar(\partial/\partial z)$  —  $z$ -компонента оператора импульса. Поперечные к направлению электрического поля лазерного импульса компоненты плотности тока и дипольного ускорения равны нулю, поскольку расплывание волновой функции  $\psi$  симметрично относительно оси  $z$ . Спектр дипольного ускорения

$$a_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} a(t)e^{-i\omega t} dt \quad (5)$$

имеет плато в области высоких частот, много больших лазерной частоты [10, 11].

Кроме высокочастотной части спектр дипольного ускорения обладает также низкочастотной частью. Далее нас будет интересовать нулевая гармоника  $a_0$  дипольного ускорения, поскольку она пропорциональна ОПТ  $j_{\text{RCD}}$  свободных электронов, величина которой связана с величиной нулевой гармоники дипольного ускорения равенством  $j_{\text{RCD}} = eN_g a_0$ . При вычислении остаточной плотности тока необходимо принимать во внимание, что после прохождения лазерного импульса, на временах  $t \gg \tau_p$ , полная плотность тока  $j(t)$ , которая находится из формулы (4), включает в себя, помимо остаточной плотности тока свободных электронов, также и быстро осциллирующую плотность тока  $j_b(t)$  электронов, находящихся в связанных состояниях. Частота осцилляций плотности тока  $j_b(t)$  определяется энергиями переходов между наиболее населенными связанными состояниями. Один из способов отделения плотности тока  $j_b(t)$  от полной плотности тока  $j(t)$  при  $t \gg \tau_p$  состоит в следующем [18]. Волновая функция  $\psi$  умножается на функцию-маску  $f(r)$ , которая равна единице при  $r = 0$  и спадает до нуля на масштабе в несколько боровских радиусов  $r_B = 5.29 \times 10^{-9}$  см (как показывают численные расчёты достаточно использовать  $10r_B$ ). Получившаяся функция  $\psi_b(\mathbf{r}, t) = f(r)\psi(\mathbf{r}, t)$  есть суперпозиция лишь связанных состояний, поскольку они локализованы вблизи иона, а ионизированный волновой пакет при  $t \gg \tau_p$  удаляется от иона на значительное расстояние. Величина плотности тока  $j_b(t)$  находится из формулы

$$j_b(t) = \frac{eN_g}{m_e} \langle \psi_b | \hat{p}_z | \psi_b \rangle. \quad (6)$$

Далее величина  $j_{\text{RCD}}$  находится как разность полной плотности тока  $j(t)$  и плотности тока связанных состояний  $j_b(t)$ ,

$$j_{\text{RCD}} = j(t) - j_b(t). \quad (7)$$

Описанный метод расчёта остаточной плотности тока свободных электронов  $j_{\text{RCD}}$ , основанный на использовании теоремы Эренфеста, является очень удобным с вычислительной точки зрения, поскольку при этом достаточно решать

численно уравнение (1) лишь в небольшой окрестности ядра, локализованной в пределах нескольких осцилляторных радиусов. При расчёте спектров ГВГ использование теоремы Эренфеста также даёт существенные преимущества, выражающиеся в значительном снижении шумовой составляющей в вычисляемом спектре дипольного ускорения.

### 3. Алгоритмы быстрого решения трёхмерного нестационарного уравнения Шрёдингера

#### 3.1. Разложение по сферическим гармоникам

При решении трехмерного нестационарного УШ (1) в случае центрально симметричного электростатического потенциала  $V(r)$  и линейно поляризованного внешнего электрического поля удобно использовать разложение электронной волновой функции по сферическим гармоникам (см., например, работы [52—54]):

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{l_{\max}} \Psi_l(r, t) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (8)$$

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = [(2l+1)(l-m)!/4\pi(l+m)!]^{1/2} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (9)$$

Здесь  $\theta, \varphi$  есть полярный и азимутальный углы в сферической системе координат  $(r, \theta, \varphi)$  с центральной осью, направленной по оси  $z$  (вдоль электрического поля),  $l$  - орбитальный момент,  $m$  - магнитный момент,  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  - сферические гармоники,  $P_l^m(\cos \theta)$  - полиномы Лежандра. Вследствие цилиндрической симметрии задачи магнитный момент  $m$  является сохраняющимся во времени квантовым числом, определяющимся начальным состоянием квантовой системы. Например, для атома, находящегося изначально в  $s$  состоянии,  $m = 0$ . В случае начальных состояний, представляющих суперпозицию состояний с разными магнитными квантовыми числами, в разложении (8) необходимо вести сумму по магнитному моменту  $m$ . Максимальное значение орбитального момента  $l_{\max}$  в выражении (8) определяется исходя из параметров электрического поля.

При подстановке (8) в нестационарное УШ (1) получается система связанных одномерных уравнений для радиальных функций  $\Psi_l(r, t)$  (здесь и далее, если не указано иного, используется атомная система единиц, в которой  $|e| = m_e = \hbar = 1$ ):

$$i \frac{\partial \Psi_l}{\partial t} = \left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) \right] \Psi_l + rE(c_{l-1,m} \Psi_{l-1} + c_{l,m} \Psi_{l+1}), \quad (10)$$

где  $c_{lm} = [((l+1)^2 - m^2)/(2l+1)(2l+3)]^{1/2}$ . Дипольное ускорение, приобретаемое квантовой системой, выражается через радиальные функции как

$$a(t) = -E(t) - 2 \sum_{l=0}^{\infty} c_{lm} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} \Psi_l^* \Psi_{l+1} \frac{\partial V}{\partial r} dr. \quad (11)$$

Для описания численного алгоритма решения системы уравнений (10) удобно воспользоваться матричной записью:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = (\hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{W}})\Psi(r,t), \quad (12)$$

где  $\Psi$  - вектор-столбец с  $l$ -ым элементом, равным  $\Psi_l(r,t)$ . Элементы диагональной матрицы  $\hat{\mathbf{R}}$  равны

$$[\hat{\mathbf{R}}]_{ll} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r), \quad (13)$$

и элементы трехдиагональной матрицы  $\hat{\mathbf{W}}$  равны

$$[\hat{\mathbf{W}}]_{kl} = \begin{cases} c_{l-1,m}rE(t), & k = l - 1 \\ c_{lm}rE(t), & k = l + 1 \\ 0 & \text{в ином случае.} \end{cases} \quad (14)$$

Пропагация волновой функции  $\Psi(r,t)$  на шаг по времени  $\Delta t$  может быть выполнена с помощью приближенного симметричного разложения оператора временной эволюции:

$$\Psi(r,t + \Delta t) \approx e^{-i\Delta t\hat{\mathbf{W}}(t+\Delta t/2)/2}e^{-i\Delta t\hat{\mathbf{R}}}e^{-i\Delta t\hat{\mathbf{W}}(t+\Delta t/2)/2}\Psi(r,t) + O(\Delta t^3). \quad (15)$$

Расчёт результата применения первого и третьего оператора может быть выполнен с использованием диагонализации матрицы  $\hat{\mathbf{W}}$  и унитарного преобразования  $\hat{\mathbf{W}} = \hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{W}}_{\text{diag}}\hat{\mathbf{S}}^\dagger$ , где  $\hat{\mathbf{W}}_{\text{diag}}$  - диагональная матрица и  $\hat{\mathbf{S}}$  - аналитически известная унитарная матрица:

$$e^{-i\Delta t\hat{\mathbf{W}}/2} = \hat{\mathbf{S}}e^{-i\Delta t\hat{\mathbf{W}}_{\text{diag}}/2}\hat{\mathbf{S}}^\dagger. \quad (16)$$

Результат применения второго оператора можно получить с использованием метода Кранка—Николсона:

$$e^{-i\Delta t\hat{\mathbf{R}}} \approx (1 + i\Delta t\hat{\mathbf{R}}/2)^{-1}(1 - i\Delta t\hat{\mathbf{R}}/2). \quad (17)$$

Вторую производную в операторе  $\hat{\mathbf{R}}$  удобно вычислить с использованием приближения Нумерова [53, 54].

Для дополнительного ускорения расчётов и повышения их точности можно использовать неэквидистантную сетку, сгущающуюся при приближении  $r$  к нулю. Использование разложения по сферическим гармоникам и неэквидистантной сетки позволяет добиться существенного сокращения вычислительных ресурсов по сравнению с решением УШ в декартовых координатах. Время расчёта может быть сокращено на несколько порядков в зависимости от пара-

метров действующего электрического поля и структуры исходного состояния атома.

### 3.2. Решение в цилиндрической системе координат

Другим вариантом понижения используемых вычислительных ресурсов и времени расчёта для решения нестационарного УШ (1) является использование цилиндрической системы координат  $(\rho, \varphi, z)$ . Существенное снижение времени расчёта в этом случае также достигается в случае, когда атом находится в линейно поляризованном вдоль оси  $z$  поле. Однако в отличие от разложения по сферическим гармоникам, рассмотренного в пункте 3.1, использование цилиндрической системы координат также пригодно для расчёта эволюции волновой функции в произвольном потенциале  $V(\rho, z)$  с цилиндрической симметрией (не только сферически симметричном), что делает возможным рассмотрение динамики выстроенных молекул в рамках одноэлектронного приближения.

Когда начальное состояние атома или молекулы не зависит от азимутального угла  $\varphi$  (симметрично относительно оси  $z$ ) решение нестационарного УШ также не зависит от  $\varphi$  и само уравнение содержит только две независимые переменные:

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\psi + [V(\rho, z) + zE(t)]\psi. \quad (18)$$

Дипольное ускорение, приобретаемое квантовой системой, выражается через  $\psi(\rho, z, t)$  как

$$a(t) = -E(t) - 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} \rho \frac{\partial V}{\partial z} |\psi|^2 d\rho. \quad (19)$$

Для численного решения уравнения (18) может быть использован псевдоспектральный метод [17, 18], в рамках которого оператор Гамильтона разделяется на два некоммутирующих оператора — кинетической энергии  $\hat{H}_p = -\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]$  и потенциальной энергии  $U(\rho, z, t) = V(\rho, z) + zE(t)$ . Пропагация волновой функции на шаг по времени  $\Delta t$  производится с помощью приближённой формулы

$$\psi(\rho, z, t + \Delta t) = e^{-i\Delta t\bar{U}/2} e^{-i\Delta t\hat{H}_p} e^{-i\Delta t\bar{U}/2} \psi(\rho, z, t) + O(\Delta t^3), \quad (20)$$

где  $\bar{U} = U(\rho, z, t + \Delta t/2)$ . Такая аппроксимация обеспечивает точность второго порядка по  $\Delta t$ . Для численной реализации псевдоспектрального метода производится аппроксимация волновой функции на прямоугольной сетке по координатам  $\rho$  и  $z$ . Применение операторной экспоненты, включающей потенциальную энергию  $\bar{U}$ , производится непосредственным умножением двух функций, зависящих от  $\rho$  и  $z$ :  $\psi_1(\rho, z) = e^{-i\bar{U}\Delta t/2} \psi(\rho, z, t)$ . Пропагация волновой функ-

ции под действием второй операторной экспоненты  $e^{-i\hat{H}_p\Delta t}$  производится в три этапа: (а) применяется интегральное преобразование

$$\bar{\psi}(k_\rho, k_z) = \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{ik_z z} \int_0^{\infty} J_0(k_\rho \rho) \psi_1(\rho, z) \rho d\rho, \quad (21)$$

где  $J_0(\xi)$  есть функция Бесселя первого рода нулевого порядка; (б) вычисляется произведение в пространстве волновых чисел,  $\bar{\psi}_1(k_\rho, k_z) = e^{-i\Delta t(k_\rho^2 + k_z^2)/2} \bar{\psi}(k_\rho, k_z)$ ; и (в) применяется обратное интегральное преобразование:

$$\psi_2(\rho, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z e^{-ik_z z} \int_0^{\infty} J_0(k_\rho \rho) \bar{\psi}_1(k_\rho, k_z) k_\rho dk_\rho. \quad (22)$$

На последнем этапе, в соответствии с формулой (20), вычисляется значение волновой функции в момент времени  $t + \Delta t$  как

$$\psi(\rho, z, t + \Delta t) = e^{-i\Delta t \bar{U}/2} \psi_2(\rho, z). \quad (23)$$

Для численной реализации интегральных преобразований (21) и (22) могут быть использованы алгоритмы быстрого преобразования Фурье и дискретного преобразования Ханкеля [55].

Важно отметить, что при использовании дискретного преобразования Фурье и дискретного преобразования Ханкеля для решения нестационарного уравнения Шрёдингера расчётная сетка в координатном пространстве должна содержать достаточно большое число узлов для того, чтобы избежать проблемы алиасинга, т.е. наложения высокочастотных колебаний волновой функции на низкочастотные. Для этого размер шага по координате должен быть много меньше максимального значения длины волны де Бройля в данной физической задаче. Другой важной проблемой, возникающей при решении нестационарного УШ (в любой системе координат), является отражение волновой функции от границы расчётной области (или её возникновение с другого края сетки при использовании дискретного преобразования Фурье). Для подавления негативного влияния этого эффекта используются поглощающие слои, расположенные около границ расчётной области [56].

## 4. Модельные потенциалы пониженной размерности

### 4.1. Одномерные модельные потенциалы

Наиболее часто используемым одномерным (1D) модельным потенциалом является потенциал, предложенный в работе [22] для численных расчётов энергетических спектров фотоэлектронов при надпороговой ионизации атомов. Вдали от заряженной частицы, с которой взаимодействует электронный волновой пакет, этот потенциал асимптотически близок к кулоновскому потенциалу. В точке нахождения заряженной частицы ни сам потенциал, ни его производные не имеют разрывов и не обращаются в бесконечность, поэтому этот потенциал получил название *soft-core* потенциал. Позже было обращено внимание на то, что запись *soft-core* потенциала должна зависеть от рассматриваемой системы из тех соображений, что энергия связи частиц должна быть равной экспериментально измеренной величине. Для атома водорода этот потенциал есть

$$V_{1D}(z) = -\frac{1}{\sqrt{z^2 + 2}}, \quad (24)$$

где значение параметра сглаживания кулоновской сингулярности соответствует совпадению энергии основного состояния в потенциале с потенциалом ионизации атома водорода [24].

Однако ещё в 1994 году в работе [24] было показано, что при использовании *soft-core* потенциала для расчётов спектров ГВГ полученные величины спектральных интенсивностей могут на несколько порядков отличаться от соответствующих величин, даваемых точным решением трёхмерного нестационарного УШ. Аналогичный вывод о значительных ошибках в расчётах спектров ГВГ, которые могут возникать при использовании *soft-core* потенциала, был сделан в 2005 году в работе [57]. Авторы [57] предложили использовать для расчётов спектров ГВГ другой модельный потенциал, имеющий излом в точке нахождения заряженной частицы, с которой взаимодействует электронный волновой пакет. Для атома водорода этот потенциал имеет вид

$$V_{1D}(z) = -\frac{1}{|z| + 1}. \quad (25)$$

В начале координат первая производная от потенциала имеет разрыв, из-за чего он был назван *solid-core* потенциал [18]. Зависимость амплитуды рекомбинации от кинетической энергии фотоэлектронов для такого потенциала хорошо согласуется с соответствующей зависимостью для кулоновского потенциала [57]. Путём сравнения с результатами расчётов трёхмерного нестационарного УШ было показано, что при достаточно высоких значениях интенсивно-

сти ( $\sim 10^{15}$  Вт/см<sup>2</sup>) и малой длительности лазерного импульса (порядка одного периода поля) использование такого потенциала для атома водорода гораздо точнее описывает высокочастотную часть спектра дипольного ускорения электрона, чем при использовании soft-core потенциала [57].

В 2010 году в работе [18] было показано, что в широкой, интересной с практической точки зрения области значений параметров лазерных импульсов использование solid-core потенциала, так же как и soft-core потенциала, при расчётах спектров ГВГ может приводить к значительным ошибкам. Были предложены два новых вида модельных потенциалов, симулирующих электростатический потенциал ионов атома водорода, а также обобщение этих потенциалов на атомы различных инертных газов. Для этого было рассмотрено следующее двухпараметрическое семейство одномерных потенциалов, асимптотически близких к кулоновскому потенциалу вдали от иона:

$$V_{1D}(z) = -\frac{1}{(|z|^\alpha + \beta)^{1/\alpha}}. \quad (26)$$

Здесь  $\alpha$  и  $\beta$  — параметры, которые определяют гладкость функции  $V_{1D}(z)$  в точке нахождения иона и энергию основного состояния. На рисунке 1 (а) показаны зависимости, связывающие параметры  $\alpha$  и  $\beta$ , найденные из условия, что модуль энергии основного состояния в потенциалах (26) совпадает с потенциалом ионизации атома водорода  $I_p = 13.6$  эВ.

Для нахождения значений параметров  $\alpha$  и  $\beta$  потенциала (26), при которых достигается высокая точность расчёта высокочастотных спектров ГВГ, рассчитывался интеграл от спектральной интенсивности  $|a_\omega|^2$  по интервалу вблизи края высокочастотного плато при ионизации атомов водорода. Было показано, что при расчётах спектров ГВГ с использованием потенциалов, принадлежащих семейству (26), величины спектральных интенсивностей хорошо согласуются с результатами, даваемыми решением трёхмерного нестационарного УШ, в широком диапазоне интенсивностей ( $\sim 2 \times 10^{14} - 10^{15}$  Вт/см<sup>2</sup>), длительностей ( $\tau_p \gtrsim 4$  фс) и длин волн ( $\sim 1 - 2$  мкм) лазерных импульсов при  $\alpha \approx 3/2$ . Потенциалы семейства (26) при  $\alpha = 3/2$  были названы *pliant-core* потенциалами. В случае атома водорода выражение для *pliant-core* потенциала имеет следующий вид:

$$V_{1D}(z) = -\frac{1}{(|z|^{3/2} + 1.45)^{2/3}}. \quad (27)$$

Второй вид потенциалов, обсуждавшийся в работе [18], соответствует значению  $\alpha = 1/2$  в (26). Для атома водорода выражение для этого потенциала есть

$$V_{1D}(z) = -\frac{1}{(|z|^{1/2} + 0.6)^2}. \quad (28)$$

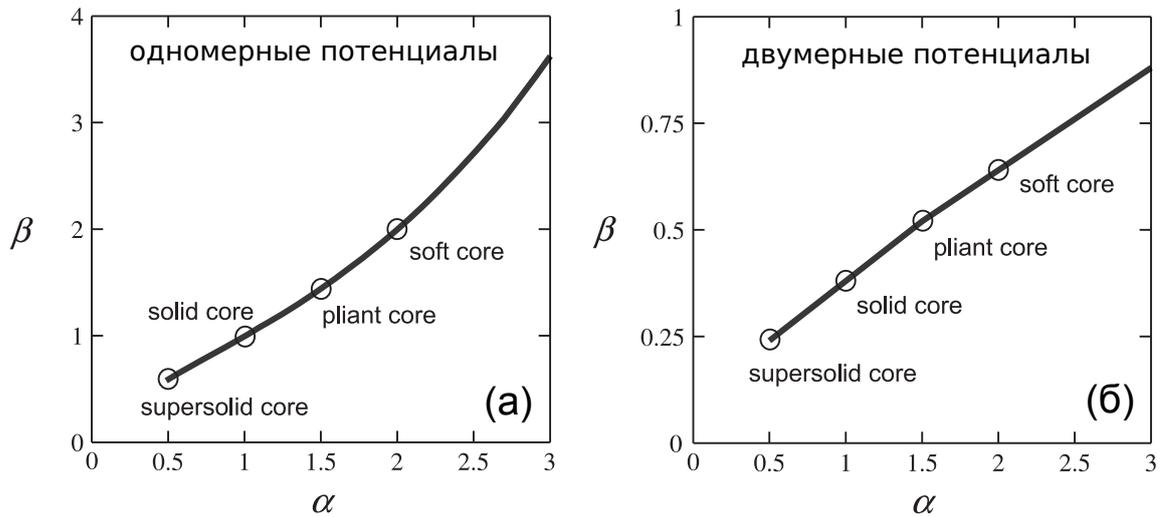


Рис. 1. Зависимости, связывающие параметры  $\alpha$  и  $\beta$  в выражениях для (а) одномерных модельных потенциалов семейства (26) и (б) двумерных модельных потенциалов семейства (29). Приведённые зависимости найдены из условия равенства модуля энергии основного состояния в этих потенциалах с потенциалом ионизации атома водорода  $I_p = 13.6$  эВ. На рисунке точками отмечены значения параметров  $\alpha$  и  $\beta$ , соответствующие soft-core и solid-core потенциалам [формулы (24), (25) и (30), (31) соответственно], а также предложенным в работе [18] pliant-core и supersolid-core потенциалам [формулы (27), (28), и (32), (33) соответственно]

Первая производная от функции  $V_{1D}(z)$  в данном случае обращается в бесконечность в начале координат, и поэтому потенциал (28) является более острым вблизи иона, чем solid-core потенциал. Потенциалы такого вида были названы *supersolid-core* потенциалами. В [18] было показано, что вероятность туннельной ионизации из supersolid-core потенциала для атома водорода с высокой точностью совпадает с вероятностью туннельной ионизации из кулоновского потенциала. Поскольку наиболее важной стадией электронной динамики, определяющей величину ОПТ, является ионизация, расчёт ОПТ с помощью supersolid-core потенциалов хорошо согласуется с расчётами ОПТ с помощью трёхмерного нестационарного УШ в широком диапазоне рассмотренных интенсивностей и длительностей лазерных импульсов.

Модельные pliant-core и supersolid-core потенциалы для атома водорода могут быть обобщены для их использования в одноэлектронном моделировании других атомов, например, атомов инертных газов (He, Ne, Ar, Kr и Xe). Для них в работе [18] были рассчитаны значения параметров  $\beta$ , при которых энергия основного состояния в pliant-core и supersolid-core потенциалах совпадает с известными из экспериментов значениями потенциалов ионизации атомов инертных газов. Найденные значения параметров  $\beta$  приведены в таблице 1.

Таблица 1. Значения параметра  $\beta$  для одномерных и двумерных pliant-core ( $\alpha = 3/2$ ) и supersolid-core ( $\alpha = 1/2$ ) потенциалов, найденные из условия, что модуль энергии основного состояния совпадает с потенциалами ионизации  $I_p$  атома водорода и атомов инертных газов He, Ne, Ar, Kr и Xe. Общее выражение для модельных одномерных потенциалов дается формулой (26), для двумерных потенциалов — формулой (29).

		$\beta$			
		1D pliant core	1D supersolid core	2D pliant core	2D supersolid core
атом	$I_p$ (эВ)	( $\alpha = 1.5$ )	( $\alpha = 0.5$ )	( $\alpha = 1.5$ )	( $\alpha = 0.5$ )
H	13.60	1.45	0.60	0.52	0.24
He	24.59	0.49	0.38	0.089	0.095
Ne	21.56	0.62	0.42	0.14	0.12
Ar	15.76	1.11	0.54	0.35	0.20
Kr	14.00	1.37	0.58	0.48	0.23
Xe	12.13	1.78	0.65	0.69	0.27

#### 4.2. Двумерные модельные потенциалы

По аналогии с одномерными модельными потенциалами рассмотрим семейство двумерных (2D) модельных потенциалов, которые вдали от иона асимптотически близки к точному кулоновскому потенциалу:

$$V_{2D}(x, z) = -\frac{1}{\left((x^2 + z^2)^{\alpha/2} + \beta\right)^{1/\alpha}}. \quad (29)$$

Двумерные аналоги рассмотренных выше одномерных модельных потенциалов характеризуются теми же значениями коэффициента  $\alpha$ , что и в одномерных моделях. На рисунке 1 (б) показаны зависимости, связывающие параметры  $\alpha$  и  $\beta$ , найденные из условия, что модуль энергии основного состояния в потенциалах (29) совпадает с потенциалом ионизации атома водорода. Запишем выражения для рассматриваемых потенциалов в случае атома водорода: soft-core потенциал [33, 58] —

$$V_{2D}(x, z) = -\frac{1}{\sqrt{x^2 + z^2 + 0.64}}, \quad (30)$$

solid-core потенциал [18] —

$$V_{2D}(x, z) = -\frac{1}{\sqrt{x^2 + z^2 + 0.39}}, \quad (31)$$

pliant-core потенциал [18] —

$$V_{2D}(x, z) = -\frac{1}{\left((x^2 + z^2)^{3/4} + 0.52\right)^{2/3}} \quad (32)$$

и supersolid-core потенциал [18] —

$$V_{2D}(x, z) = -\frac{1}{\left((x^2 + z^2)^{1/4} + 0.24\right)^2}. \quad (33)$$

В таблице 1 также приведены значения параметра  $\beta$ , при которых энергия связи электронов в основных состояниях двумерных pliant-core и supersolid-core потенциалов совпадает с потенциалами ионизации атомов различных инертных газов.

## 5. Примеры численных расчётов

### 5.1. Метод расчёта

В этом разделе приведены результаты использования одномерных и двумерных потенциалов для расчётов высокочастотной части спектров ГВГ и остаточной плотности тока при различных интенсивностях и длительностях лазерных импульсов, а также представлено сопоставление с результатами, даваемыми трёхмерными (3D) расчётами. В качестве ионизируемого атома рассматривается атом водорода. Для того, чтобы обеспечить равенство нулю нулевой гармоники электрического поля, оно задаётся как

$$\begin{cases} E(t) = -\frac{1}{c} \frac{dA}{dt}, \\ A(t) = -\frac{cE_0}{\omega_L} \sin(\omega_L t + \varphi_{\text{СЕР}}) \exp\left(-\frac{t^2}{\tau^2}\right). \end{cases} \quad (34)$$

$$\quad (35)$$

Здесь  $A(t)$  — проекция на ось  $z$  векторного потенциала,  $\omega_L$  — несущая частота лазерного импульса,  $E_0$  — максимум огибающей,  $\varphi_{\text{СЕР}}$  — фаза предельно короткого лазерного импульса,  $\tau = \tau_p / \sqrt{2 \ln 2}$ , где  $\tau_p$  — полная длительность импульса по уровню интенсивности  $1/2$ . Амплитуда поля связана с пиковой интенсивностью соотношением  $I = I_a E_0^2$ , где  $I_a = 3.51 \times 10^{16}$  Вт/см<sup>2</sup> — атомная единица интенсивности.

В представленных здесь расчётах, опубликованных ранее в работе [18], решение трёхмерного нестационарного УШ для атома водорода проводится в цилиндрической системе координат  $(\rho, \theta, z)$  с использованием алгоритма, описанного в разделе 3.2, для кулоновского потенциала иона  $V(\rho, z) = -1/\sqrt{\rho^2 + z^2}$ . Численное решение 1D и 2D нестационарного УШ проводится с помощью псевдоспектрального метода, в котором для преобразования волновой функции из координатного представления в импульсное используется быстрое преобразование Фурье [18]. Вычисления проводятся в области  $-z_{\text{max}} \leq z \leq z_{\text{max}}$  (1D задача),  $-z_{\text{max}} \leq z \leq z_{\text{max}}$ ,  $-x_{\text{max}} \leq x \leq x_{\text{max}}$  (2D задача), и  $-z_{\text{max}} \leq z \leq z_{\text{max}}$ ,  $0 \leq \rho \leq \rho_{\text{max}}$  (3D задача). Для подавления отражения от границ вычислительной области и возникающих волновых пакетов на противоположном краю сетки используется поглощение волновой функции в области  $\tilde{z} \leq |z| \leq z_{\text{max}}$ ,  $\tilde{x} \leq |x| \leq x_{\text{max}}$ ,  $\tilde{\rho} \leq \rho \leq \rho_{\text{max}}$  [56, 59]. Интегрирование по времени  $t$  проводится в области  $-t_{\text{max}} \leq t \leq t_{\text{max}}$  с шагом  $\Delta t$ . Для достижения необходимой точности расчётов используются следующие параметры:  $\tilde{x} = \tilde{\rho} = 40r_B$ ,  $x_{\text{max}} = 51.2r_B$ ,  $\rho_{\text{max}} = 60r_B$ ,  $\tilde{z} = 3r_{\text{osc}}$ ,  $z_{\text{max}} \geq 4r_{\text{osc}}$ ,  $t_{\text{max}} = 4\tau_p$ ,  $\Delta t = 0.02t_a$ , где  $r_{\text{osc}} = E_0/\omega_L^2$  — осцилляторный радиус электрона, соответствующий максимальной амплитуде поля,  $t_a = 2.42 \times 10^{-17}$  с — атомная единица времени. Для 1D и 2D задач, пространственные шаги выбраны равными  $\Delta z = 0.1r_B$  и  $\Delta z = \Delta x = 0.2r_B$  соответственно. При решении трёхмерного неста-

ционарного УШ используется эквидистантная сетка по  $z$  с шагом  $\Delta z = 0.25r_B$ , тогда как узлы сетки по  $\rho$  расположены неэквидистантно: они сгущаются при приближении к  $\rho = 0$  и их полное число равно  $N_\rho = 500$ .

## 5.2. Высокочастотная часть спектра электронного тока

Рассмотрим сначала лазерный импульс с очень малой длительностью  $\tau_p$  (равной одному периоду поля), центральной длиной волны  $\lambda_L = 2\pi c/\omega_L = 800$  нм и высокой интенсивностью  $I = 1.14 \times 10^{15}$  Вт/см<sup>2</sup>. Спектры ГВГ  $|a_\omega|^2$ , найденные с помощью одномерных моделей и точного трёхмерного расчёта, показаны на рисунке 2. Видно, что спектр ГВГ, полученный с использованием solid-core модели, хорошо согласуется со спектром, найденным из полноразмерного расчёта, тогда как для soft-core и pliant-core моделей спектральные интенсивности оказываются заниженными на несколько порядков.

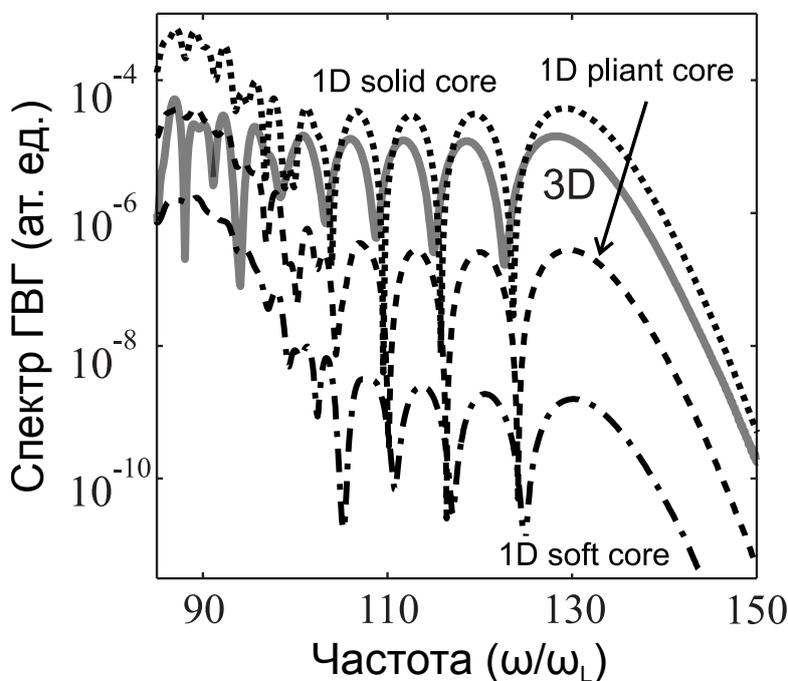


Рис. 2. Спектры ГВГ, найденные на основе решения одномерного нестационарного УШ с использованием модельных потенциалов и на основе точного трёхмерного расчёта для импульса с центральной длиной волны 800 нм, длительностью  $\tau_p = 2.67$  фс, фазой  $\phi_{\text{сер}} = 0$  и интенсивностью  $I = 1.14 \times 10^{15}$  Вт/см<sup>2</sup>. Толстая сплошная кривая – решение трёхмерной задачи, тонкая сплошная кривая – решение одномерного нестационарного УШ с использованием pliant-core потенциала (27), пунктирная кривая – soft-core потенциала (24), штриховая кривая – solid-core потенциала (25)

Рассмотрим теперь более длинный импульс ( $\tau_p = 4$  фс) с более низкой интенсивностью  $I = 5 \times 10^{14}$  Вт/см<sup>2</sup> (см. рисунок 3 (а)). Для таких параметров наилучшее согласие с решением трёхмерной задачи достигается с использованием одномерного pliant-core потенциала, тогда как solid-core модель завышает

спектральную интенсивность вблизи края плато более чем на порядок, а soft-core модель ещё сильнее занижает эту величину. Спектры ГВГ, найденные с использованием двумерных моделей, в целом дают гораздо лучшее согласие с результатом 3D расчёта (см. рисунок 3 (б)). Тем не менее, спектральные интенсивности, найденные с использованием двумерных solid-core и soft-core моделей, отличаются на половину порядка от результата трёхмерного расчёта в области края плато, в то время как pliant-core модель согласуется с трёхмерным расчётом. При большей длине волны лазерного импульса,  $\lambda_L = 1200$  нм, и большем числе периодов поля,  $N = 5$  ( $\tau_p = 20$  фс), расчёты спектров ГВГ с использованием pliant-core потенциалов также хорошо согласуются с трёхмерными расчётами (см. рисунок 4).

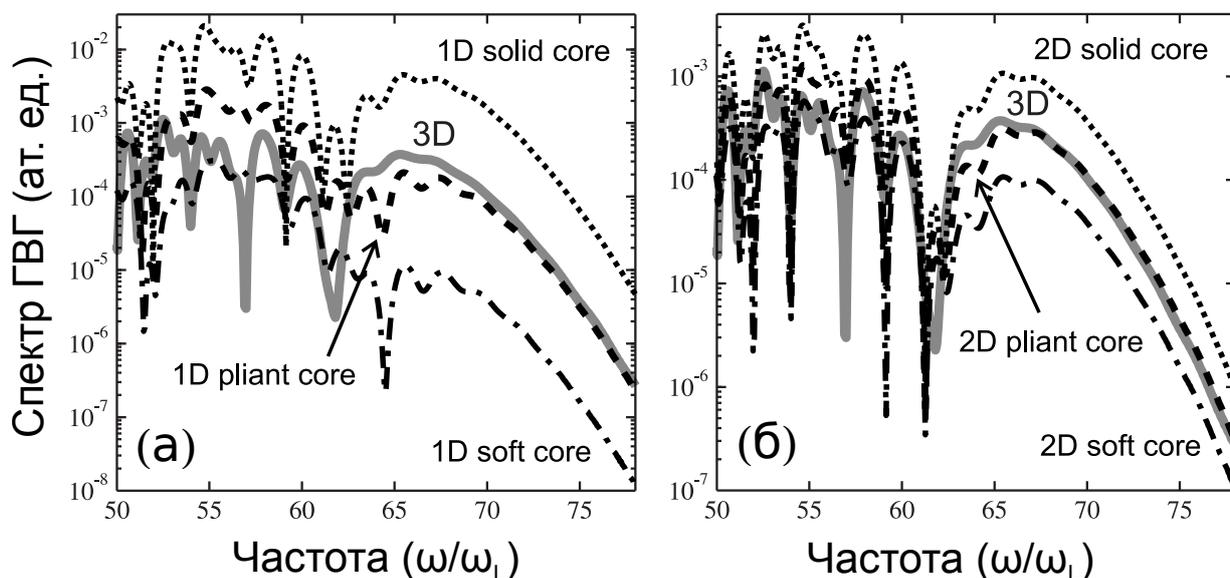


Рис. 3. Спектры ГВГ, найденные на основе решения (а) одномерного и (б) двумерного нестационарного УШ с использованием модельных потенциалов и на основе трёхмерного расчёта для импульса с центральной длиной волны 800 нм, длительностью  $\tau_p = 4$  фс, фазой  $\varphi_{\text{СЕР}} = 0$  и интенсивностью  $I = 5.9 \times 10^{14}$  Вт/см<sup>2</sup>. Толстая сплошная кривая – результат трёхмерного расчёта, тонкие сплошные кривые – результаты расчёта с использованием pliant-core потенциалов, пунктирные кривые – soft-core потенциалов, штриховые кривые – solid-core потенциалов

### 5.3. Остаточная плотность тока свободных электронов

Продemonстрируем теперь, насколько точно использование различных моделей пониженной размерности позволяет описывать процессы генерации низкочастотных токов. В качестве нормировки для величины  $j_{\text{RCD}}$  будем использовать максимальную осцилляторную плотность тока,  $j_{\text{osc}} = -N_g v_{\text{osc}}$ , где  $v_{\text{osc}} = E_0/\omega_L$ . Заметим, что при использовании такой нормировки величина  $j_{\text{norm}}$  не зависит от плотности газа  $N_g$ . Рассмотрим зависимости  $j_{\text{norm}}(\varphi_{\text{СЕР}}) = -j_{\text{norm}}(\varphi_{\text{СЕР}} + \pi)$  нормированной плотности тока от фазы  $\varphi_{\text{СЕР}}$  при фиксированной длительности

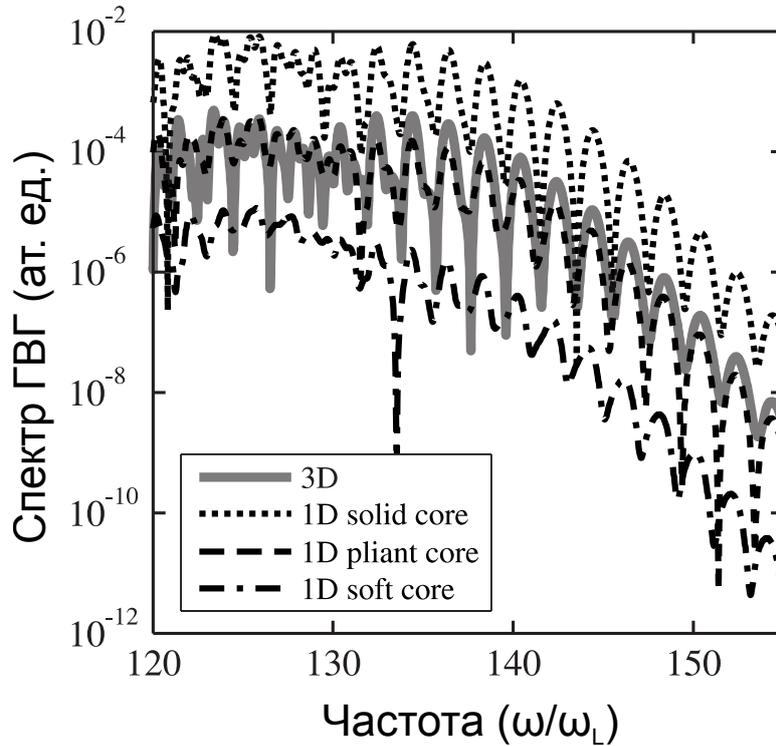


Рис. 4. То же, что на рисунке 2, но для длины волны 1200 нм, длительности 20 фс и интенсивности  $3 \times 10^{14}$  Вт/см<sup>2</sup>

$\tau_p$  и различных фиксированных значениях интенсивности  $I$ . Точное определение этих зависимостей имеет большое значение для экспериментов по измерению фазы предельно коротких лазерных импульсов [5,8,14]. При этом наиболее существенным является точное нахождение оптимальной фазы  $\varphi_{\text{opt}}$ , при которой абсолютная величина  $j_{\text{norm}}$  имеет максимум, а также максимальной нормированной плотности тока  $j_{\text{max}} = |j_{\text{norm}}(\varphi_{\text{opt}})|$ .

На рисунке 5 показаны зависимости  $j_{\text{norm}}(\varphi_{\text{СЕР}})$ , рассчитанные с использованием низкоразмерных моделей и трёхмерного нестационарного УШ для импульсов с длительностью  $\tau_p = 4$  фс и различными фиксированными значениями интенсивности  $I$ . Как видно из рис. 5, при всех рассмотренных значениях лазерной интенсивности использование supersolid-core потенциалов даёт практически точные значения максимальной нормированной плотности тока  $j_{\text{max}}$ . Оптимальная фаза  $\varphi_{\text{opt}}$ , которая находится с использованием supersolid-core потенциалов, также хорошо согласуется с величиной, найденной из трёхмерного расчёта при всех рассмотренных значениях интенсивности. Различия в найденных значениях  $j_{\text{norm}}$  между расчётами с использованием supersolid-core потенциалов и трёхмерными расчётами имеются только при низких значениях интенсивностей  $I \lesssim 10^{13}$  Вт/см<sup>2</sup>. Как видно из рисунка 5, расчёты  $j_{\text{norm}}(\varphi_{\text{СЕР}})$  с помощью других низкоразмерных моделей приводят к сильному завышению  $j_{\text{max}}$ .

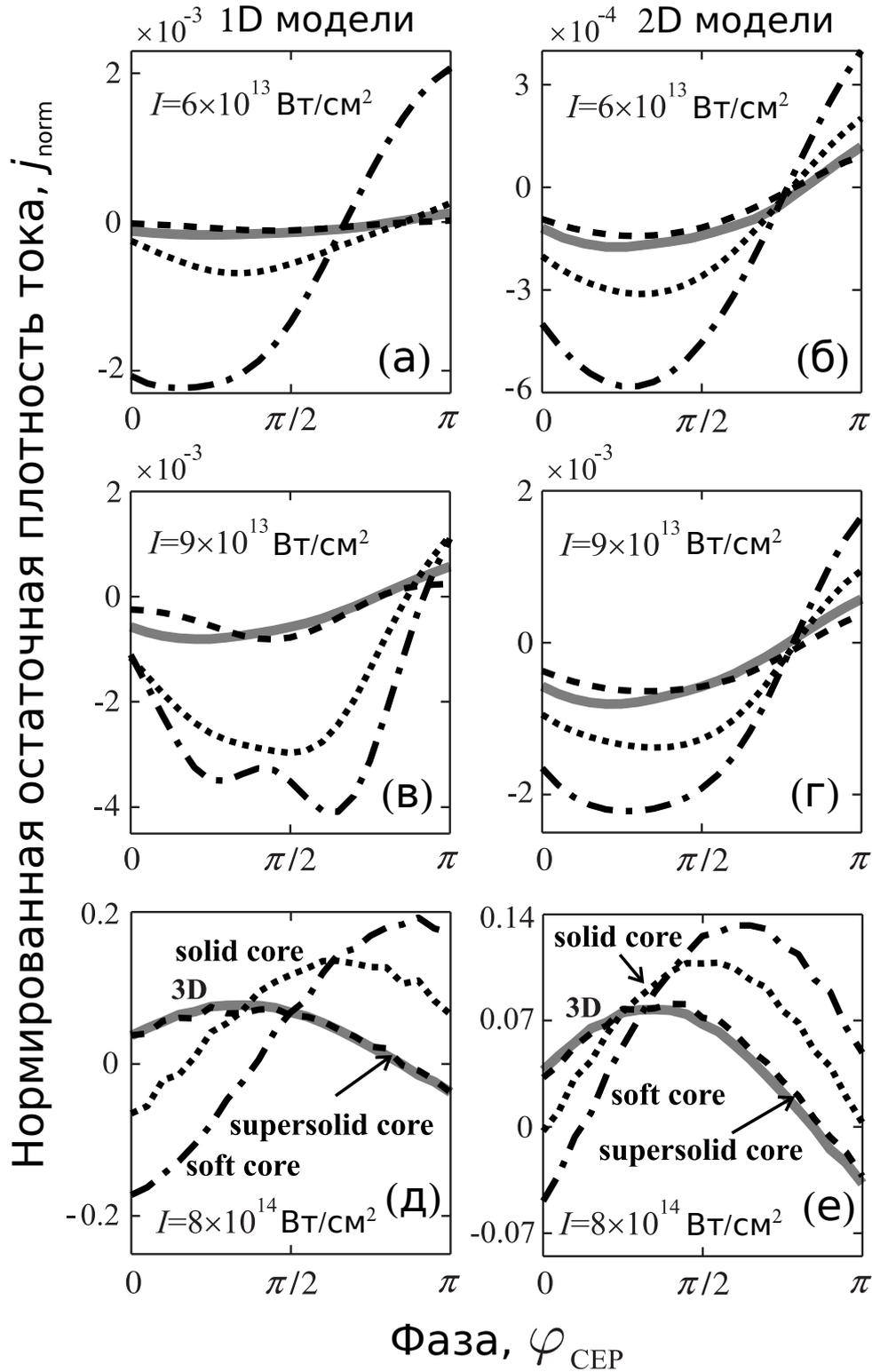


Рис. 5. Зависимости нормированной остаточной плотности тока  $j_{\text{norm}} = j_{\text{RCD}}/j_{\text{osc}}$ , где  $j_{\text{osc}} = E_0 N_g / \omega_L$ , от фазы  $\varphi_{\text{CSP}}$  для импульсов с длительностью  $\tau_p = 4$  фс, центральной длиной волны  $\lambda_L = 800$  нм и тремя различными фиксированными значениями интенсивности  $I$ :  $6 \times 10^{13}$  ВТ/см<sup>2</sup> (а, б),  $9 \times 10^{13}$  ВТ/см<sup>2</sup> (в, г),  $8 \times 10^{14}$  ВТ/см<sup>2</sup> (д, е). Толстые сплошные кривые – результат трёхмерного расчёта, штрихпунктирные кривые — результаты расчёта с использованием soft-core потенциалов, пунктирные кривые – solid-core потенциалов, штриховые кривые – supersolid-core потенциалов

## 6. Амплитуды рекомбинации и вероятности квазистатической ионизации

### Вероятности квазистатической туннельной ионизации

Несмотря на одинаковое значение энергии основного состояния, вероятность ионизации для различных модельных потенциалов может различаться существенным образом. Чтобы показать это, рассмотрим вероятность ионизации в единицу времени  $w$  атома из основного состояния в статическом электрическом поле  $E$  в широком диапазоне  $E < 0.16E_a$ , который охватывает режимы как туннельной, так и надбарьерной ионизации. Для нахождения  $w$  в работе [18] решалось стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}\psi = \varepsilon\psi \quad (36)$$

с гамильтонианом

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V(r) + Ez. \quad (37)$$

Находился спектр комплексных собственных значений  $\varepsilon$  гамильтониана с граничным условием излучения в направлении электрического поля. Энергетический спектр состоит из серии квазидискретных уровней, ширина которых определяет время их жизни. Вероятность ионизации в единицу времени пропорциональна мнимой части  $\varepsilon$  [60]. Если электрон находится изначально в основном состоянии, то  $w = |2\text{Im}(\varepsilon_0)|$ , где  $\varepsilon_0$  — энергия низшего квазистационарного состояния. Для нахождения  $w(|E|)$  использовался метод комплексного вращения координат [61].

На рисунке 6 показаны функции  $w(|E|)$ , рассчитанные для одномерных и двумерных модельных потенциалов, а также для трёхмерного кулоновского потенциала. Скорость ионизации для разных модельных потенциалов сильно различается, несмотря на одинаковую энергию основного состояния и асимптотику потенциалов вдали от иона. Скорость ионизации для soft-core, solid-core и pliant-core существенно выше, чем для кулоновского потенциала. Вероятность ионизации, рассчитанная для supersolid-core потенциала, практически точно совпадает с соответствующей величиной, найденной для кулоновского потенциала, для всего рассмотренного диапазона значений напряжённости поля.

Сильное различие вероятностей ионизации для разных моделей связано с сильным отличием модельных потенциалов друг от друга вблизи начала координат. Барьер, который необходимо преодолеть электрону для отрыва от иона, имеет различную ширину и высоту для разных модельных потенциалов. Это видно из рисунка 7, на котором показан суммарный электростатический потенциал, создаваемый внешним электрическим полем и родительским ионом, для модельных потенциалов для случая атома водорода.

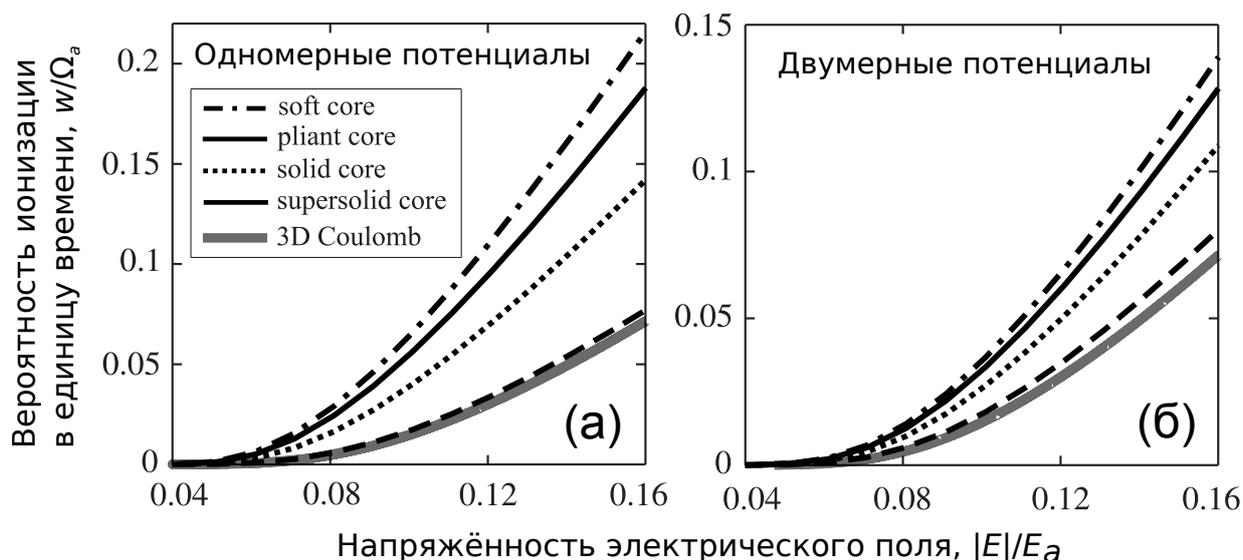


Рис. 6. Вероятности квазистатической туннельной ионизации в единицу времени  $w$  из кулоновского потенциала, а также (а) одномерных soft-core, solid-core, pliant-core, supersolid-core потенциалов, и (б) соответствующих двумерных потенциалов, как функции напряженности электрического поля  $E$ , отнесенной к атомной единице напряженности  $E_a$

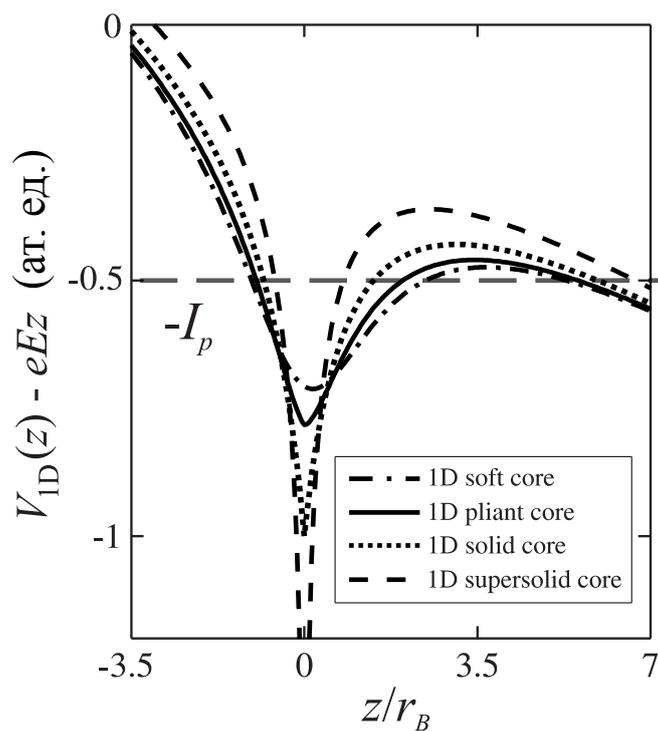


Рис. 7. Суммарный электростатический потенциал, создаваемый внешним электрическим полем  $|E| = 0.06E_a$  и родительским ионом, для различных модельных потенциалов атома водорода. Горизонтальная пунктирная линия показывает энергию основного состояния невозмущенного атома. Здесь  $r_B$  — боровский радиус атома

## Амплитуды рекомбинации

Амплитуда рекомбинации [57, 62] в основное состояние  $\psi_0$  атома определяется матричным элементом

$$A_{rec} = \left\langle \psi_0 \left| \frac{\partial V(r)}{\partial z} \right| \psi_p \right\rangle. \quad (38)$$

Здесь  $\psi_p \propto \exp(ipz)$  есть плоская волна, описывающая электрон, движущийся вдоль оси  $z$  с кинетической энергией  $E_{kin} = p^2/2$ ,  $\psi_0$  — волновая функция основного состояния. Будем нормировать  $\psi_0$  на единицу, а  $\psi_p$  — на дельта функцию по импульсу. Когда используются такие нормировки, амплитуды рекомбинации в одномерной и двумерной задачах суть

$$A_{1D} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{ipz} \psi_0^*(z) \frac{\partial V_{1D}(z)}{\partial z} dz \quad (39)$$

и

$$A_{2D} = \frac{1}{2\pi} \int e^{ipz} \psi_0^*(x, z) \frac{\partial V_{2D}(x, z)}{\partial z} dx dz \quad (40)$$

соответственно. Для кулоновского потенциала  $V_{3D}(r) = -1/r$  амплитуда рекомбинации вычисляется аналитически [57, 62]

$$A_{3D} = \frac{i\sqrt{2} p - \arctan p}{\pi p^2}. \quad (41)$$

Заметим, что величины (39) — (41) имеют различные размерности. Поэтому имеет смысл сравнивать только их зависимости от  $E_{kin}$ , но не абсолютные величины.

Зависимости  $|A_{1D}|^2(E_{kin})$ ,  $|A_{2D}|^2(E_{kin})$  и  $|A_{3D}|^2(E_{kin})$ , рассчитанные в работе [18], показаны на рисунке 8. Амплитуды рекомбинации суть спадающие при  $E_{kin} \gg I_p$  функции  $E_{kin}$  с декрементом, зависящим от вида модельного потенциала. Для soft-core потенциалов, наиболее гладких в начале координат, декременты функций  $|A_{1D}|^2(E_{kin})$  и  $|A_{2D}|^2(E_{kin})$  наиболее высоки. Для pliant-core потенциалов амплитуда рекомбинации спадает медленнее. Для solid-core потенциалов зависимость амплитуды рекомбинации от  $E_{kin}$  хорошо согласуется с результатом для кулоновского потенциала. Наконец, декремент затухания амплитуды рекомбинации наиболее мал для supersolid-core потенциалов, наиболее острых в точке нахождения иона.

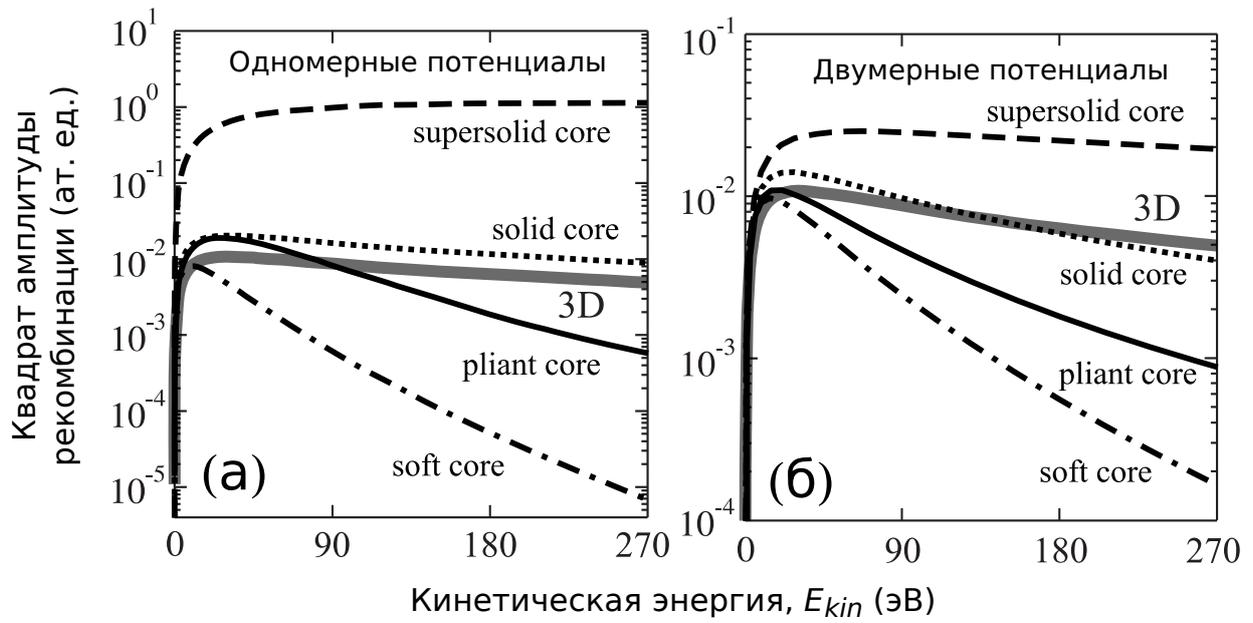


Рис. 8. Амплитуды рекомбинации [формулы (39) — (41)] как функции кинетической энергии  $E_{kin}$  фотоэлектрона для кулоновского потенциала и (а) одномерных потенциалов, (б) двумерных модельных потенциалов

## 7. Обсуждение результатов численных расчётов

Рассмотрим сначала результаты расчётов спектров ГВГ, представленные в параграфе 5.2. Как видно, при достаточно малой длительности (порядка одного периода поля) и высокой интенсивности ( $\sim 10^{15}$  Вт/см<sup>2</sup>), наилучшее согласие с трёхмерными расчётами достигается при использовании solid-core моделей. В то же время для большего числа периодов поля ( $N \sim 2 - 5$ ) в широком диапазоне остальных параметров лазерного импульса (интенсивность  $\sim 2 \times 10^{14} - 10^{15}$  Вт/см<sup>2</sup>, длина волны  $\sim 0.8 - 2$  мкм) наилучшее согласие с трёхмерными расчётами спектров ГВГ в области края плато достигается при использовании pliant-core потенциалов. Этот результат может казаться удивительным, поскольку solid-core потенциалы дают более точную зависимость амплитуды рекомбинации от кинетической энергии по сравнению с pliant-core потенциалами. Тем не менее, использование solid-core потенциалов приводит к завышению спектральной интенсивности вблизи края плато для большого диапазона рассмотренных интенсивностей, вплоть до  $10^{15}$  Вт/см<sup>2</sup>. Для того, чтобы объяснить этот факт, нужно принять во внимание, что на выход гармоник влияют факторы, связанные с процессами электронной динамики на всех трёх стадиях процесса ГВГ [10], а не только на третьей, заключительной его стадии (рекомбинация электрона с родительским ионом). На первой стадии процесса ГВГ большую роль играет вероятность ионизации атома в единицу времени, величина которой сильно влияет одновременно и на амплитуду возвращающегося волнового пакета, и на населённость основного состояния атома в момент возврата к ядру. На второй стадии процесса ГВГ (движение электрона в континууме) главным фактором, влияющим на эффективность ГВГ, является распыливание волновой функции. Также на стадии движения электрона в континууме существенную роль может играть кулоновская фокусировка волнового пакета [63, 64], которая приводит к увеличению амплитуды рассеиваемого волнового пакета, в том числе и вклада в ГВГ траекторий электронов с множественными возвратами. Вообще говоря, влияние каждого из этих факторов на выход гармоник зависит как от размерности задачи, так и от вида потенциала иона. При использовании pliant-core потенциалов комбинация указанных факторов, влияющих на выход гармоник, приводит к тому, что спектральные интенсивности ГВГ, а также суммарная мощность ГВГ в области края плато хорошо согласуются с соответствующими величинами, найденными из решения трёхмерной задачи.

Использование supersolid-core потенциалов даёт значения остаточной плотности тока, которые хорошо согласуются с результатами решения трёхмерной задачи и имеют гораздо более высокую точность, чем результаты, получаемые с использованием других низкоразмерных моделей. Расхождения с результатами трёхмерных расчётов проявляются только при больших длительностях лазерных импульсов и достаточно низких интенсивностях лазерных импульсов

(когда параметр Келдыша [65] порядка и выше единицы). Следует отметить, что при таких параметрах, во-первых, вероятность ионизации в единицу времени не является мгновенной функцией поля [21, 65] и, во-вторых, на эволюцию волнового пакета в континууме сильно влияет взаимодействие с потенциалом иона [7]. Модели пониженной размерности не способны описывать процессы ионизации и рассеяния с необходимой точностью, что приводит к ошибкам в определении остаточной плотности тока. При высоких интенсивностях ионизация носит туннельный характер, и влияние процессов рассеяния на родительском ионе ниже. При использовании supersolid-core потенциалов стадия туннельной ионизации описывается с высокой точностью, что приводит к корректным результатам расчётов остаточной плотности тока.

## 8. Заключение

В данном учебно-методическом пособии рассмотрены алгоритмы решения трехмерного нестационарного УШ в сферической и цилиндрической системах координат и представлены обзор и сравнение известных квантовомеханических моделей пониженной размерности, используемых для расчёта электронных токов, возбуждаемых при ионизации газа ультракороткими лазерными импульсами. Высокочастотная часть этих токов ответственна за генерацию экстремального ультрафиолетового и мягкого рентгеновского излучения, тогда как низкочастотная часть ответственна за генерацию терагерцового излучения.

При расчёте высокочастотной части электронных токов в широком диапазоне параметров лазерных импульсов, таких как длительность ( $\sim 2 - 5$  периодов поля), интенсивность ( $\sim 2 \times 10^{14} - 10^{15}$  Вт/см<sup>2</sup>) и длина волны ( $\sim 0.8 - 2$  мкм), наилучшее согласие с трёхмерными расчётами спектров ГВГ в области края плато достигается при использовании *pliant-core* потенциалов. Для атома водорода эти потенциалы задаются формулами (27), (32), для атомов инертных газов параметры одномерных и двумерных *pliant-core* потенциалов представлены в таблице 1. В то же время, для очень коротких лазерных импульсов (с длительностью порядка одного периода поля) высокой интенсивности ( $I \gtrsim 10^{15}$  Вт/см<sup>2</sup>) наибольшая точность обеспечивается при использовании *solid-core* потенциалов (формулы (25) и (31), соответственно). При низкой интенсивности  $I \lesssim 10^{14}$  Вт/см<sup>2</sup> лазерного излучения рассмотренные потенциалы дают близкие значения спектральной интенсивности вблизи края плато, но наиболее хорошее согласие с трёхмерным расчётом достигается при использовании *soft-core* потенциалов (формулы (24) и (30), соответственно).

Наиболее важной стадией электронной динамики, определяющей величину остаточной плотности тока, является ионизация. Наилучшее согласие с кулоновским потенциалом в скорости туннельной ионизации дает использование одномерных и двумерных *supersolid-core* потенциалов (эти потенциалы для атома водорода даны формулами (28) и (33), соответственно; для атомов инертных газов параметры *supersolid-core* потенциалов представлены в таблице 1). В результате, использование *supersolid-core* потенциалов для расчётов остаточной плотности тока даёт количественно хорошее согласие с трёхмерным расчётом в широком диапазоне интенсивностей ( $I \gtrsim 10^{13}$  Вт/см<sup>2</sup>) и длительностей (до двух периодов поля). При большей длительности область применимости *supersolid-core* моделей ограничена диапазоном малых значений параметра Келдыша. Заметим, что, как показывают численные расчёты, использование *supersolid-core* потенциалов позволяет также с достаточно высокой точностью рассчитывать возбуждение остаточной плотности тока в активно обсуждаемых в настоящее время схемах генерации терагерцового излучения, использующих бихроматические лазерные импульсы [66—68].

## Список литературы

- [1] *McPherson A., Gibson G., Jara H., Johann U., Luk T. S., McIntyre I. A., Boyer K., Rhodes C. K.* Studies of multiphoton production of vacuum-ultraviolet radiation in the rare gases // *J. Opt. Soc. Am. B.* — 1987. — Vol. 4. — P. 595.
- [2] *Krausz F., Ivanov M.* Attosecond physics // *Rev. Mod. Phys.* — 2009. — Vol. 81. — P. 163.
- [3] *Кум А. В., Рябикин М. Ю., Сергеев А. М.* От фемтосекундных к аттосекундным импульсам // *Успехи физических наук.* — 1999. — Т. 169. — С. 58.
- [4] *Емелин М. Ю., Рябикин М. Ю.* Аттосекундные световые импульсы // *Нелинейные волны'2008 / Под ред. А. В. Гапонова-Грехова, В. И. Некоркина.* — Н. Новгород: ИПФ РАН, 2009. — С. 60—102.
- [5] *Kreß M., Löffler T., Thomson M. D., Dörner R., Gimpel H., Zrost K., Ergler T., Moshhammer R., Morgner U., Ullrich J., Roskos H. G.* Determination of the carrier-envelope phase of few-cycle laser pulses with terahertz-emission spectroscopy // *Nat. Phys.* — 2006. — Vol. 2. — P. 327.
- [6] *Gildenburg V. B., Vvedenskii N. V.* Optical-to-THz wave conversion via excitation of plasma oscillations in the tunneling-ionization process // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 98. — P. 245002.
- [7] *Silaev A. A., Vvedenskii N. V.* Residual-current excitation in plasmas produced by few-cycle laser pulses // *Phys. Rev. Lett.* — 2009. — Vol. 102. — P. 115005.
- [8] *Liu P., Li R., Xu Z.* Phase evolution and THz emission from a femtosecond laser filament in air // *Progress in Ultrafast Intense Laser Science XI / edited by K. Yamanouchi, C. H. Nam, P. Martin.* — Springer International Publishing, 2015. — Springer Series in Chemical Physics. — Pp. 175—193.
- [9] *Burnett K., Reed V. C., Cooper J., Knight P. L.* Calculation of the background emitted during high-harmonic generation // *Phys. Rev. A.* — 1992. — Vol. 45. — P. 3347.
- [10] *Corkum P. B.* Plasma perspective on strong field multiphoton ionization // *Phys. Rev. Lett.* — 1993. — Vol. 71. — P. 1994.
- [11] *Lewenstein M., Balcou P., Ivanov M. Yu., L'Huillier A., Corkum P. B.* Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields // *Phys. Rev. A.* — 1994. — Vol. 49. — P. 2117.

- [12] *Goulielmakis E., Schultze M., Hofstetter M., Yakovlev V. S., Gagnon J., Uiberacker M., Aquila A. L., Gullikson E. M., Attwood D. T., Kienberger R., Krausz F., Kleineberg U.* Single-cycle nonlinear optics // *Science*. — 2008. — Vol. 320. — P. 1614.
- [13] *Baltuska A., Udem T., Uiberacker M., Hentschel M., Goulielmakis E., Gohle C., Holzwarth R., Yakovlev V. S., Scrinzi A., Hansch T. W., Krausz F.* Attosecond control of electronic processes by intense light fields // *Nature*. — 2003. — Vol. 421. — P. 611.
- [14] *Wu H.-C., Meyer-ter Vehn J., Sheng Z.-M.* Phase-sensitive terahertz emission from gas targets irradiated by few-cycle laser pulses // *New J. Phys.* — 2008. — Vol. 10. — P. 043001.
- [15] *Chen M., Pukhov A., Peng X.-Y., Willi O.* Theoretical analysis and simulations of strong terahertz radiation from the interaction of ultrashort laser pulses with gases // *Phys. Rev. E*. — 2008. — Vol. 78. — P. 046406.
- [16] *Kim K.-Y.* Generation of coherent terahertz radiation in ultrafast laser-gas interactions // *Phys. Plasmas*. — 2009. — Vol. 16. — P. 056706.
- [17] *Silaev A. A., Vvedenskii N. V.* Quantum-mechanical approach for calculating the residual quasi-dc current in a plasma produced by a few-cycle laser pulse // *Phys. Scr.* — 2009. — Vol. T135. — P. 014024.
- [18] *Silaev A. A., Ryabikin M. Y., Vvedenskii N. V.* Strong-field phenomena caused by ultrashort laser pulses: Effective one- and two-dimensional quantum-mechanical descriptions // *Phys. Rev. A*. — 2010. — Vol. 82. — P. 033416.
- [19] *Alexandrov L. N., Emelin M. Yu., Ryabikin M. Yu.* Unidirectional current excitation in tunneling ionization of asymmetric molecules // *Phys. Rev. A*. — 2013. — Vol. 87. — P. 013414.
- [20] *Silaev A. A., Vvedenskii N. V.* Analytical description of generation of the residual current density in the plasma produced by a few-cycle laser pulse // *Physics of Plasmas*. — 2015. — Vol. 22. — P. 053103.
- [21] *Делоне Н. Б., Крайнов В. П.* Нелинейная ионизация атомов лазерным излучением. — Физматлит, 2001.
- [22] *Javanainen J., Eberly J. H., Su Q.* Numerical simulations of multiphoton ionization and above-threshold electron spectra // *Phys. Rev. A*. — 1988. — Vol. 38. — P. 3430.

- [23] *Tian Y.-Y., Li S.-Y., Wei S.-S., Guo F.-M., Zeng S.-L., Chen J.-G., Yang Y.-J.* Investigation on the influence of atomic potentials on the above threshold ionization // *Chin. Phys. B.* — 2014. — Vol. 23. — P. 053202.
- [24] *Rae S. C., Chen X., Burnett K.* Saturation of harmonic generation in one- and three-dimensional atoms // *Phys. Rev. A.* — 1994. — Vol. 50. — P. 1946.
- [25] *Eberly J. H., Su Q., Javanainen J.* Nonlinear light scattering accompanying multiphoton ionization // *Phys. Rev. Lett.* — 1989. — Vol. 62. — P. 881.
- [26] *Ванин Е. В., Даунер М. С., Кум А. В., Сергеев А. М.* Возбуждение сверхкоротких всплесков гармоник излучения при ионизации газа мощным лазерным импульсом // *Письма в ЖЭТФ.* — 1993. — Т. 58. — С. 964.
- [27] *Protopapas M., Lappas D. G., Keitel C. H., Knight P. L.* Recollisions, bremsstrahlung, and attosecond pulses from intense laser fields // *Phys. Rev. A.* — 1996. — Vol. 53. — P. R2933.
- [28] *Su Q., Eberly J. H., Javanainen J.* Dynamics of atomic ionization suppression and electron localization in an intense high-frequency radiation field // *Phys. Rev. Lett.* — 1990. — Vol. 64. — P. 862.
- [29] *Law C. K., Su Q., Eberly J. H.* Stabilization of a model atom undergoing three-photon ionization // *Phys. Rev. A.* — 1991. — Vol. 44. — P. 7844.
- [30] *Seideman T., Ivanov M. Y., Corkum P. B.* Role of electron localization in intense-field molecular ionization // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — Vol. 75. — P. 2819.
- [31] *Barnett R., Gibson G. N.* Static field tunneling ionization of  $H_2^+$  // *Phys. Rev. A.* — 1999. — Vol. 59. — P. 4843.
- [32] *Zhang D., Lü Z., Meng C., Du X., Zhou Z., Zhao Z., Yuan J.* Synchronizing terahertz wave generation with attosecond bursts // *Phys. Rev. Lett.* — 2012. — Vol. 109. — P. 243002.
- [33] *Protopapas M., Lappas D. G., Knight P. L.* Strong field ionization in arbitrary laser polarizations // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — Vol. 79. — P. 4550.
- [34] *Patel A., Protopapas M., Lappas D. G., Knight P. L.* Stabilization with arbitrary laser polarizations // *Phys. Rev. A.* — 1998. — Vol. 58. — P. R2652.
- [35] *Vazquez de Aldana J., Roso L.* Magnetic-field effect in atomic ionization by intense laser fields. // *Opt. Express.* — 1999. — Vol. 5. — P. 144.
- [36] *Ryabikin M. Yu., Sergeev A. M.* Stabilization window and attosecond pulse train production at atom ionization in superintense laser field // *Opt. Express.* — 2000. — Vol. 7. — P. 417.

- [37] *Parker J. S., Doherty B. J. S., Taylor K. T., Schultz K. D., Blaga C. I., DiMauro L. F.* High-energy cutoff in the spectrum of strong-field nonsequential double ionization // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Vol. 96. — P. 133001.
- [38] *Castiglia G., Corso P. P., Cricchio D., Daniele R., Fiordilino E., Morales F., Persico F.* High-order-harmonic generation in dimensionally reduced systems // *Phys. Rev. A.* — 2013. — Vol. 88. — P. 033837.
- [39] *Hansen K. K., Bauer D., Madsen L. B.* Finite-system effects on high-order harmonic generation: From atoms to solids // *Phys. Rev. A.* — 2018. — Vol. 97. — P. 043424.
- [40] *Majorosi S., Benedict M. G., Bogár F., Paragi G., Czirják A.* Density-based one-dimensional model potentials for strong-field simulations in He,  $H_2^+$ , and  $H_2$  // *Phys. Rev. A.* — 2020. — Vol. 101. — P. 023405.
- [41] *Lorin E., Chelkowski S., Bandrauk A.* A numerical Maxwell-Schrödinger model for intense laser-matter interaction and propagation // *Comp. Phys. Comm.* — 2007. — Vol. 177. — P. 908.
- [42] *Bandrauk A. D., Chelkowski S., Kawai S., Lu H.* Effect of nuclear motion on molecular high-order harmonics and on generation of attosecond pulses in intense laser pulses // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 101. — P. 153901.
- [43] *Magrakvelidze M., He F., De S., Bocharova I., Ray D., Thumm U., Litvinyuk I. V.* Angular dependence of the strong-field ionization measured in randomly oriented hydrogen molecules // *Phys. Rev. A.* — 2009. — Vol. 79. — P. 033408.
- [44] *Волкова Е. А., Попов А. М., Тихонова О. В.* Двухэлектронная ионизация квантовой системы в лазерном поле: эффект перерасcеяния и межчастичные корреляции // *ЖЭТФ.* — 2000. — Т. 118. — С. 816.
- [45] *Prauzner-Bechcicki J. S., Sacha K., Eckhardt B., Zakrzewski J.* Time-resolved quantum dynamics of double ionization in strong laser fields // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 98. — P. 203002.
- [46] *Camiolo G., Castiglia G., Corso P. P., Fiordilino E., Marangos J. P.* Two-electron systems in strong laser fields // *Phys. Rev. A.* — 2009. — Vol. 79. — P. 063401.
- [47] *Semina M. A., Sergeev R. A., Suris R. A.* The binding energy of excitons and X (+) and X (−) trions in one-dimensional systems // *Semiconductors.* — 2008. — Vol. 42. — P. 1427.

- [48] *Shahbaz A., Mueller C., Staudt A., Buervenich T. J., Keitel C. H.* Nuclear signatures in high-order harmonic generation from laser-driven muonic atoms // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 98. — P. 263901.
- [49] *Cheng T., Su Q., Grobe R.* Charge density of the fermionic vacuum // *Las. Phys.* — 2009. — Vol. 19. — P. 208.
- [50] *Reiss H. R.* Dipole-approximation magnetic fields in strong laser beams // *Phys. Rev. A.* — 2000. — Vol. 63. — P. 013409.
- [51] *Скалли М. О., Зубайри М. С.* Квантовая оптика. — Физматлит, 2003.
- [52] *Bandrauk A. D., Chelkowski S., Diestler D. J., Manz J., Yuan K. J.* Quantum simulation of high-order harmonic spectra of the hydrogen atom // *Phys. Rev. A.* — 2009. — Vol. 79. — P. 023403.
- [53] *Patchkovskii S., Muller H. G.* Simple, accurate, and efficient implementation of 1-electron atomic time-dependent Schrödinger equation in spherical coordinates // *Comp. Phys. Comm.* — 2016. — Vol. 199. — Pp. 153--169.
- [54] *Romanov A. A., Silaev A. A., Frolov M. V., Vvedenskii N. V.* Influence of the polarization of a multielectron atom in a strong laser field on high-order harmonic generation // *Phys. Rev. A.* — 2020. — Vol. 101. — P. 013435.
- [55] *Gough B.* GNU scientific library reference manual. — Network Theory Ltd., 2009.
- [56] *Silaev A. A., Romanov A. A., Vvedenskii N. V.* Multi-hump potentials for efficient wave absorption in the numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2018. — Vol. 51. — P. 065005.
- [57] *Gordon A., Santra R., Kärtner F. X.* Role of the Coulomb singularity in high-order harmonic generation // *Phys. Rev. A.* — 2005. — Vol. 72. — P. 063411.
- [58] *Бабин А. А., Ким А. В., Киселев А. Н., Сергеев А. М., Степанов А. Н.* Взаимодействие сверхсильных лазерных полей с веществом: гипотезы, эффекты, приложения // *Изв. ВУЗов. Радиофизика.* — 1996. — Т. 39. — С. 713.
- [59] *Strelkov V. V., Khokhlova M. A., Gonoskov A. A., Gonoskov I. A., Ryabikin M. Yu.* High-order harmonic generation by atoms in an elliptically polarized laser field: Harmonic polarization properties and laser threshold ellipticity // *Phys. Rev. A.* — 2012. — Vol. 86. — P. 013404.
- [60] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. — М.: Наука, 1989.

- [61] *Ivanov M. V.* Complex rotation in two-dimensional mesh calculations for quantum systems in uniform electric fields // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2001. — Vol. 34. — P. 2447.
- [62] *Gordon A., Kartner F. X.* Quantitative modeling of single atom high harmonic generation // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 95. — P. 223901.
- [63] *Ivanov M., Seideman T., Corkum P., Ilkov F., Dietrich P.* Explosive ionization of molecules in intense laser fields // *Phys. Rev. A.* — 1996. — Vol. 54. — P. 1541.
- [64] *Brabec T., Ivanov M. Yu., Corkum P. B.* Coulomb focusing in intense field atomic processes // *Phys. Rev. A.* — 1996. — Vol. 54. — P. R2551.
- [65] *Келдыш Л. В.* Ионизация в поле сильной электромагнитной волны // *ЖЭТФ.* — 1964. — Т. 47. — С. 1945.
- [66] *Lü Z., Zhang D., Meng C., Du X., Zhou Z., Huang Y., Zhao Z., Yuan J.* Attosecond synchronization of terahertz wave and high-harmonics // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2013. — Vol. 46. — P. 155602.
- [67] *Vvedenskii N. V., Korytin A. I., Kostin V. A., Murzanev A. A., Silaev A. A., Stepanov A. N.* Two-color laser-plasma generation of terahertz radiation using a frequency-tunable half harmonic of a femtosecond pulse // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Vol. 112. — P. 055004.
- [68] *Alexandrov L. N., Emelin M. Yu., Ryabikin M. Yu.* Coulomb effects in directional current excitation in the ionization of gas by a two-color laser field // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2014. — Vol. 47. — P. 204028.

**РЕДУЦИРОВАННЫЕ ПОДХОДЫ  
К КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОМУ МОДЕЛИРОВАНИЮ  
ИОНИЗАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В СИЛЬНЫХ ПОЛЯХ**

Авторы:

Николай Вадимович **Введенский**

Александр Алексеевич **Романов**

Михаил Юрьевич **Рябкин** и др.

*Учебно-методическое пособие*

Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования «Национальный  
исследовательский Нижегородский государственный  
университет им. Н.И. Лобачевского».  
603950, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23.