

Полуклассическая теория генерации аттосекундных импульсов

В.Т.Платоненко, А.Ф.Стержантов

Разработана численная модель расчета одноатомного отклика на поле линейно поляризованного лазерного импульса, длительность которого составляет несколько периодов колебаний поля. Модель основана на полуклассической теории генерации гармоник высокого порядка и разработана во временном представлении. Результаты расчетов параметров генерируемых аттосекундных импульсов, проводимых в рамках модели, находятся в хорошем согласии с результатами, получаемыми путем численного интегрирования уравнения Шредингера. Вычислительная сложность таких расчетов приблизительно на два порядка ниже, чем сложность численного интегрирования уравнения Шредингера.

Ключевые слова: аттосекундные импульсы, гармоники высокого порядка, излучательная рекомбинация, когерентность, туннельная ионизация, уравнение Шредингера, волновой пакет, численное моделирование.

1. Введение

Генерация мягкого рентгеновского излучения, возникающая при туннельной (или надбарьерной) ионизации атомов в поле световой волны и последующей когерентной излучательной рекомбинации (КИР) электронов на родительских ионах, является эффективным средством получения когерентных рентгеновских импульсов с управляемыми параметрами. В случае монохроматического возбуждающего излучения процесс КИР тождествен процессу генерации гармоник высокого порядка (ГГВП) [1, 2]. Если же в качестве возбуждающего используется лазерный импульс, длительность которого составляет несколько периодов колебаний поля, оказывается возможной генерация одиночного аттосекундного импульса (АИ) – рентгеновского импульса со сплошным спектром и длительностью, примерно на порядок меньшей периода возбуждающего поля [3].

Наблюдение и измерение параметров АИ сопряжено со значительными трудностями. Поэтому актуальным является как можно более точное и подробное предсказание этих параметров с помощью теоретического анализа и численных расчетов. Параметры полей, генерируемых в процессе КИР элементарным объемом среды, в основном определяются характером взаимодействия возбуждающего поля с одиночным атомом, влияние же атомов друг на друга обычно несущественно. Поэтому для эффективного управления параметрами АИ важно, прежде всего, понимание механизма генерации АИ одиночным атомом.

Наиболее распространенные методы теоретического описания КИР первоначально были разработаны приме-

нительно к ГГВП. Механизм ГГВП в газах относительно хорошо описывается полуклассической теорией Коркума [4]. Основные положения этой теории можно перенести и на случай КИР в поле лазерного импульса произвольной длительности. Тогда КИР следует рассматривать как сложный процесс, который включает в себя туннельную ионизацию, стадию свободного движения электрона в поле световой волны и излучательную рекомбинацию возвращающегося к родительскому иону электрона с переходом в начальное состояние. Предполагается, что ионизация и рекомбинация являются мгновенными событиями, скорость электрона непосредственно после ионизации равна нулю, траектория свободного электрона начинается и заканчивается вблизи ядра и определяется классическими уравнениями движения. Мгновенная частота света, излучаемого в некоторый момент времени (сумма энергии ионизации и кинетической энергии, приобретенной на стадии свободного движения) однозначно определяется зависимостью электрического поля от времени. Это простая одноэлектронная модель позволяет определить максимальную частоту поля, генерируемого атомом (частоту отсечки), и дает наглядное представление о механизме КИР.

Существующие на сегодняшний день теоретические модели КИР, используемые в расчетах, являются одноэлектронными. Наиболее надежные методы расчета отклика атома на сильное поле светового импульса основаны на прямом численном интегрировании уравнения Шредингера для одноэлектронного атома в осциллирующем поле. Ввиду сложности таких расчетов их затруднительно использовать для исследования генерации в макроскопической среде. Вместе с тем в случае одноэлектронного атома численное интегрирование уравнения Шредингера позволяет провести расчеты отклика с высокой точностью и может использоваться, в частности, для тестирования менее точных, но и менее сложных расчетных моделей.

В большинстве современных работ для расчетов высокочастотного отклика атома на сильное возбуждающее поле используется модель Левенштейна [5], в которой

В.Т.Платоненко. Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, физический факультет, Россия, 119992 Москва, Воробьевы горы; e-mail: plat@ati.phys.msu.ru

А.Ф.Стержантов. Международный учебно-научный лазерный центр МГУ им. М.В.Ломоносова, Россия, 119992 Москва, Воробьевы горы; e-mail: sterjantov@gmail.com

уравнение Шредингера фактически решается методом последовательных приближений, при этом используется первое приближение. В этой модели значительную часть вычислений удастся выполнить аналитически. Оставаясь относительно громоздкой, данная модель, тем не менее, часто используется для расчетов генерации в макроскопических средах. Она позволила сделать ряд правильных качественных выводов относительно зависимости атомного отклика от различных параметров, но дает результаты, сильно заниженные по амплитуде отклика по сравнению с результатами, получаемыми путем численного решения уравнения Шредингера.

В [6] был разработан относительно простой алгоритм расчетов атомного отклика на интенсивное периодическое поле, основанный на полуклассической теории. Тем самым была продемонстрирована возможность применения методов и предположений полуклассической теории не только для качественной интерпретации, но и для количественных расчетов отклика среды на поле волны. Упомянутый алгоритм основан на использовании спектрального представления и применим для описания ГГВП в поле достаточно длинного импульса. В нем в явном виде используется предположение о периодичности процесса и, следовательно, о дискретной структуре спектра генерируемого излучения. Спектр атомного отклика на короткий импульс является почти сплошным. В этом случае вычисление отклика удобнее проводить во временном представлении.

В настоящей работе на основе полуклассической теории КИР разработан алгоритм и синтезированы формулы для расчета (во временном представлении) атомного отклика на поле линейно поляризованного светового импульса произвольной длительности. Для тестирования этих формул проведен расчет отклика путем численного интегрирования уравнения Шредингера для атома водорода и сравнение результатов этого расчета с результатами, полученными на основе предложенного алгоритма. Строго говоря, предлагаемый алгоритм расчета строится в предположении о туннельном механизме ионизации. Упомянутое тестирование показывает, что он применим в более широком диапазоне интенсивностей возбуждающего света, включающем в себя области как многофотонной, так и надбарьерной ионизации.

Ниже обсуждается алгоритм расчета для произвольного атома, рассматриваемого как одноэлектронный. Затем общие формулы записываются в конкретном виде применительно к атому водорода. Кратко обсуждается методика численного интегрирования уравнения Шредингера для атома водорода и проводится сравнение результатов расчетов атомного отклика, выполненных на основе такого интегрирования и с использованием предложенного алгоритма.

2. Теоретическая модель

Под высокочастотным откликом атома мы будем понимать среднее по квантовому состоянию значение силы $-\nabla V$, действующей на электрон со стороны иона (V – потенциал, создаваемый ионом). Волновая функция электрона представляется в виде суперпозиции волновой функции основного состояния Ψ_0 и свободного волнового пакета $\delta\Psi$. Предполагается, что в выражении для среднего значения силы можно пренебречь слагаемым $\langle \delta\Psi | -\nabla V | \delta\Psi \rangle$ и величина $\langle \Psi_0 | -\nabla V | \Psi_0 \rangle$ тождественно

равна нулю, поэтому среднее значение силы может быть вычислено по формуле

$$f(t) = \langle \Psi_0 | -\nabla V | \delta\Psi \rangle + \text{компл. сопр.} \quad (1)$$

Выражение для волновой функции основного состояния имеет вид

$$\Psi_0(t, \mathbf{r}) = \sqrt{N_0(t)} \varphi_0(\mathbf{r}) \exp\left(\frac{i}{\hbar} I t\right), \quad (2)$$

где φ_0 – собственная функция атомного гамильтониана; I – потенциал ионизации атома;

$$N_0(t) = \exp\left[-\int_{-\infty}^t w(\tau) d\tau\right] \quad (3)$$

– населенность состояния; w – вероятность ионизации. Предполагается, что эта вероятность является мгновенной функцией напряженности электрического поля E :

$$w(t) = W(E(t)). \quad (4)$$

Предположение о мгновенном характере ионизации в полуклассической теории КИР является принципиальным. В частности, оно используется как базовое при конструировании волнового пакета свободного электрона.

Поскольку основное состояние локализовано в малой области пространства, значительный вклад в силу (1) дает лишь небольшая часть волнового пакета $\delta\Psi$, находящаяся вблизи иона. Только в этой области пакет $\delta\Psi$ и должен быть описан. Здесь он может быть представлен в виде суммы плоских квазиклассических пакетов следующего вида:

$$\varphi(t, x) = \sqrt{\rho(t)} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(t, x)\right], \quad (5)$$

где ρ – плотность волнового пакета; S – действие; x – координата вдоль направления линейно поляризованного возбуждающего поля E . Структура функций (5) определяется на основе следующих соображений, тесно связанных с предположением о мгновенном характере ионизации и рекомбинации. В момент времени t мимо ядра пролетает электрон, туннелировавший в момент времени t_{ion} в точку $x_{\text{ion}}(E(t))$. Предполагается, что величины ρ и S в (5) определяются траекторией и временем свободного полета этого электрона, которые рассчитываются с помощью классических уравнений движения (см. ниже). Одновременно рассчитывается и время $t_{\text{ion}}(t)$. Фактически расчет зависимостей $t_{\text{ion}}(t)$ является основным трудоемким этапом вычислений, требующим использования численных методов. Он выполняется на основе следующих предположений.

Движение электрона описывается уравнением Ньютона

$$\frac{d^2 x}{dt'^2} = -\frac{e}{m} E(t'), \quad (6)$$

где $t' \in [t_{\text{ion}}, t]$. Непосредственно после ионизации (в момент $t_{\text{ion}}(t)$) электрон неподвижен, т. е.

$$\dot{x}(t_{\text{ion}}) = 0, \quad (7)$$

и находится в точке x_{ion} , зависящей от мгновенного значения напряженности поля:

$$x(t_{\text{ion}}) = x_{\text{ion}}(E(t_{\text{ion}})); \quad (8)$$

движение электрона заканчивается вблизи родительского иона, т. е.

$$x(t) = 0. \quad (9)$$

Проинтегрировав дважды уравнение (6) и подставив в полученное выражение условия (7)–(9), можно записать следующее уравнение, связывающее t_{ion} и t :

$$\frac{mc}{e} x_{\text{ion}}(t_{\text{ion}}) + \int_{t_{\text{ion}}}^t A(\tau) d\tau - (t - t_{\text{ion}})A(t_{\text{ion}}) = 0, \quad (10)$$

где $A(\tau)$ – векторный потенциал. Координата туннелирования x_{ion} (8) определяется из уравнения

$$-eV(x_{\text{ion}}) - eE(t_{\text{ion}})x_{\text{ion}} = -I. \quad (11)$$

Пара моментов времени (t_{ion}, t) , являющаяся решением уравнения (10), однозначно определяет одну из возможных траекторий электрона $x(t')$. Важно отметить, что при фиксированном t уравнение (10) в общем случае имеет несколько корней $t_{\text{ion}}(t)$, т. е. существует несколько различных моментов ионизации, соответствующих одному моменту рекомбинации. Это связано с наличием осцилляций в зависимости $E(t')$. В конечном выражении для силы (1) следует просуммировать вклад от всех возможных рекомбинирующих электронов, траектории которых определяются многозначной зависимостью $t_{\text{ion}}(t)$. Пока же предполагается, что волновой пакет свободного электрона содержит только одно слагаемое вида (5), соответствующее одному из корней $t_{\text{ion}}(t)$. Таким образом, далее волновой пакет свободного электрона представляется в виде

$$\delta\Psi(t, x) = \varphi(t, x).$$

Действие S вычисляется по формуле

$$S(t, x) = It_{\text{ion}} - \int_{t_{\text{ion}}}^t \frac{p_x^2(\tau)}{2m} d\tau + (x - x_{\text{ion}})p_x, \quad (12)$$

где p_x – механический импульс свободного электрона. Свободная константа в (12) выбрана такой, чтобы фазы волнового пакета $\delta\Psi$ и волновой функции основного состояния Ψ_0 совпадали в момент ионизации в точке $x = x_{\text{ion}}$.

Плотность ρ волнового пакета свободного электрона можно оценить как отношение числа электронов, ионизовавшихся за промежуток времени δt_{ion} , к объему, содержащему эти электроны в соответствующий момент рекомбинации. Данный объем равен произведению сечения волнового пакета S_{\perp} (оно будет определено ниже) на расстояние, пролетаемое пакетом со скоростью p_x/m за время $\delta t = |dt/dt_{\text{ion}}|\delta t_{\text{ion}}$. В итоге получаем

$$\rho = \frac{N_0(t_{\text{ion}})w(t_{\text{ion}})\delta t_{\text{ion}}}{(p_x/m)\delta t S_{\perp}} = \frac{N_0(t_{\text{ion}})mw(t_{\text{ion}})}{S_{\perp}p_x} \left| \frac{dt_{\text{ion}}}{dt} \right|. \quad (13)$$

Импульс электрона p_x можно найти из закона сохранения канонического импульса. Тогда

$$p_x(t) = \frac{e}{c}[A(t) - A(t_{\text{ion}})]. \quad (14)$$

Производную dt_{ion}/dt можно определить из уравнения (10). На основе правила дифференцирования неявных функций получаем

$$\frac{dt_{\text{ion}}}{dt} = \frac{A(t) - A(t_{\text{ion}})}{(t - t_{\text{ion}})\dot{A}(t_{\text{ion}}) - (mc/e)\dot{x}_{\text{ion}}(t_{\text{ion}})}. \quad (15)$$

Сечение S_{\perp} волнового пакета можно оценить следующим образом. Поскольку время свободного полета $t - t_{\text{ion}}$, как правило, велико, волновой пакет электрона в процессе свободного движения сильно расплывается. Его сечение S_{\perp} определяется в основном дисперсией поперечной составляющей импульса, начальный же размер электрона можно не учитывать. Тогда $S_{\perp} \approx K\pi(p_{\perp}^2/m^2)(t - t_{\text{ion}})^2$, где p_{\perp}^2 – дисперсия поперечной составляющей импульса после ионизации.

Применительно к туннельному режиму ионизации для дисперсии импульса в [7] получено выражение $p_{\perp}^2 = 2mE/E_0$, где $E_0 = (e/r_B^2)(I/Ry)^{1/2}$ – внутриатомное поле; r_B – борковский радиус в атоме водорода. Используя этот результат, можно представить выражение для сечения волнового пакета электрона, подлетающего к родительскому иону, в виде

$$S_{\perp} \approx K\pi r_B^2 \frac{2E(t_{\text{ion}})I}{me} (t - t_{\text{ion}})^2 \left(\frac{Ry}{I} \right)^{1/2}, \quad (16)$$

где K – безразмерный коэффициент, который вводится из следующих соображений. Отношение $S_{\perp}/(\pi r_B^2)$ всегда велико, т. е. свободный волновой пакет сильно расплывается. Естественно предположить, что кулоновские силы приводят к некоторому стягиванию пакета к оси, не обязательно однородному и особенно существенному при малых значениях импульса p_x , когда электрон медленно проходит область силового центра. Это стягивание можно рассматривать как рассеяние на кулоновском центре. Поэтому мы вводим корректирующий множитель K , записывая выражение для него аналогично тому, как это сделано в [6], в виде

$$K(p_x) = \frac{\pi r_B^2}{\pi r_B^2 + S_{\text{sc}}(p_x)}, \quad (17)$$

где $S_{\text{sc}}(p_x) = 16\pi r_B^2 m^2 I^2 / p_x^4$ – сечение рассеяния классического электрона с импульсом p_x на углы, превышающие $\pi/2$.

После подстановки (2), (5) и (12) в (1) выражение для силы приобретает вид

$$f(t) \approx -a(t) \exp[-i\Phi(t)] + \text{компл. сопр.}, \quad (18)$$

где

$$a(t) = \langle \varphi_0 | -\nabla V | \exp(-ip_x x/\hbar) \rangle (N_0 \rho)^{1/2}; \quad (19)$$

$$\Phi(t) = \frac{1}{\hbar} \left[I(t - t_{\text{ion}}) + \int_{t_{\text{ion}}}^t \frac{p_x^2(\tau)}{2m} d\tau + x_{\text{ion}} p_x(t) \right]. \quad (20)$$

2.1. Атом водорода

Приведенные выше формулы записаны для произвольного атома. Чтобы получить замкнутую систему формул и уравнений необходимо конкретизировать вид потенциала, создаваемого ионом, вероятности ионизации (4) и волновой функции основного состояния Ψ_0 . Ниже такая процедура выполнена для атома водорода.

В этом случае $(-\nabla V)_x = -e^2 x/r^3$. Уравнение (11) имеет решение

$$x_{\text{ion}}(t_{\text{ion}}) = \frac{I}{2eE(t_{\text{ion}})} + \left\{ \left[\frac{I}{2eE(t_{\text{ion}})} \right]^2 - \frac{e}{E(t_{\text{ion}})} \right\}^{1/2}. \quad (21)$$

При $E(t_{\text{ion}}) > I^2/(4e^3)$ подкоренное выражение в (21) отрицательно (ионизация приобретает характер надбарьерной). В дальнейших расчетах в такой ситуации мы вычисляем координату туннелирования по формуле

$$x_{\text{ion}}(t_{\text{ion}}) = \frac{I}{2eE(t_{\text{ion}})}. \quad (22)$$

Для вероятности ионизации атома водорода далее используется формула [8]

$$W_{\text{H}}(E) = \frac{2I4E_0}{\hbar E} \exp\left(\frac{-2E_0}{3E}\right). \quad (23)$$

Соотношение же (4) мы записываем, заменив в его правой части аргумент t на $t - \hbar/I$ (целесообразность такой замены обсуждалась в [6]):

$$w_{\text{H}}(t) = W_{\text{H}}(E(t - \hbar/I)). \quad (24)$$

После подстановки функции φ_0 , соответствующей основному состоянию атома водорода, в выражение (19) оно принимает вид

$$a_{\text{H}} = 8iIG \left(\frac{p_x}{p_0} \right) (\pi r_{\text{В}} N_0 \rho)^{1/2}, \quad (25)$$

где

$$G(\xi) = \frac{\xi - \arctan \xi}{\xi^2}; \quad p_0 = \sqrt{2mI}.$$

Таким образом, сила, действующая со стороны иона на электрон в атоме водорода, может быть аналитически вычислена по формулам (18)–(20) с учетом выражений (3), (13)–(16), (20), (21)–(25) и зависимостей $t_{\text{ion}}(t)$, получаемых путем численного решения уравнения (10). В конечном выражении (18) вклад от всех корней $t_{\text{ion}}(t)$ должен быть просуммирован. Заметим, что первообразная от $A(t)$ в (10) может быть найдена аналитически либо предварительно затабулирована. Поэтому уравнение (10) можно рассматривать как алгебраическое. При решении данного уравнения нами использовался простой, но достаточно эффективный с точки зрения техники вычислений алгоритм, изложенный в Приложении.

В целом алгоритм расчета атомного отклика содержит следующие этапы:

1. Табулируются или вычисляются аналитически вектор-потенциал электрического поля A , импульс и квадрат импульса свободного электрона (14), а также их первообразные, населенность $N_0(t)$.

2. Решается уравнение (10) для всех возможных значений t .

3. Для каждого решения уравнения (10) по формулам (23), (24), (21), (22), (16), (17), (13), (15) рассчитываются вероятность ионизации $W(E(t_{\text{ion}}))$, координата туннелирования $x_{\text{ion}}(t_{\text{ion}}(t))$, сечение S_{\perp} , плотность ρ волнового пакета. В конечном счете все эти величины являются функциями текущего времени t .

4. Для каждого решения уравнения (10) по формулам (20), (25) рассчитываются фаза Φ и амплитуда a_{H} силы, действующей на электрон.

5. По формуле (18) вычисляется зависимость $f(t)$ и проводится суммирование вкладов от всех корней $t_{\text{ion}}(t)$ уравнения (10). (На самом деле основной вклад в КИР дают электроны, которые находятся в свободном состоянии в течение времени, меньшего одного периода поля. Мы провели ряд расчетов, в которых не учитывались свободные электроны, рекомбинирующие после ионизации за время, превышающее период поля. В области малых частот (близких к I/\hbar) результаты таких расчетов незначительно отличались от результатов расчетов, учитывающих все свободные электроны, а в области высоких частот полностью совпадали с ними.)

Хотя проведенный выше анализ относился к одноэлектронному атому, он может быть использован и для многоэлектронных атомов с привлечением модельных потенциалов. В этом смысле важно, что от свойств конкретного атома в полученных выражениях сильно зависит лишь вероятность ионизации, потенциал иона $V(r)$ и волновая функция основного состояния Ψ_0 . Вопрос о вероятности ионизации в туннельном режиме рассматривался в [9] и ряде других работ. Потенциалы, создаваемые различными ионами, исследовались в работе [10]. Используя результаты этих работ, можно применить развитую теорию в случае многоэлектронных атомов.

3. Расчет отклика с использованием численного интегрирования уравнения Шредингера

Для тестирования описанного алгоритма мы провели ряд расчетов величины

$$f_{\text{num}}(t) = \langle \Psi | -\nabla V | \Psi \rangle, \quad (26)$$

в которых волновая функция Ψ находилась численным интегрированием уравнения Шредингера для атома водорода

$$i\hbar\dot{\Psi} = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r} + exE(t) \right] \Psi,$$

где E – электрическое поле линейно поляризованного светового импульса. Использовался метод численного интегрирования, обсуждавшийся в [11]. Расчеты проводились в цилиндрических координатах на сетке с переменными шагами. Чтобы избежать отражений от границ, использовались плавно включающиеся поглотители. Размеры и максимальные шаги пространственной сетки, а также параметры поглотителей менялись до тех пор, пока это влияло на получаемые результаты.

4. Обсуждение результатов и выводы

Тестовые расчеты проводились с использованием косинус-импульса с длительностью в два с половиной периода и длиной волны 1.06 мкм, показанного на рис.1. Там же приведена временная зависимость полной силы, действующей на электрон.

На рис.2 представлены спектры сил (1) и (26), рассчитанных по формулам разработанной модели и полученных численным интегрированием уравнения Шредингера при пиковой мощности возбуждающего импульса 2.5×10^{14} Вт/см² соответственно. (Поскольку полуклассическая теория применима лишь для описания излучения с частотами $\omega > I/\hbar$, показана только эта область спектра.) В области высоких частот наблюдается хорошее соответствие частот отсечки и квадратов фурье-образов силы $f_\omega(\omega)$, полученных двумя способами.

В связи с этим заметим, что выделение одиночного АИ из суммарного поля излучения сводится именно к выделению из всего генерируемого спектра небольшого интервала частот, прилегающего к частоте отсечки. Излучение с такими частотами генерируется в конце полупериода, где напряженность электрического поля возбуждающей волны максимальна [12] (рис.3). Поэтому совпадение спектров (1) и (26) в области частоты отсечки обеспечивает и совпадение выделяемых АИ.

Спектральная фильтрация проводилась по формуле

$$f_{\text{fil}}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\delta\Omega} f_\omega(\omega) \exp(-i\omega t) d\omega, \quad (27)$$

где $\delta\Omega$ – интервал частот, показанный на рис.2. Квадраты модуля силы (27), рассчитанные с использованием спектров, показанных на рис.2, приведены на рис.3. Видно, что полученные с помощью спектральной фильтрации АИ близки друг другу по длительности, амплитуде, спектральному наполнению и генерируются в один и тот же момент времени.

Аналогичным образом можно выделить и другие участки спектра, лежащие внутри плато на рис.2. (При перемещении интервала частот $\delta\Omega$ в глубь плато получающиеся АИ оказываются все менее контрастными.) При этом результаты, полученные двумя способами, практи-

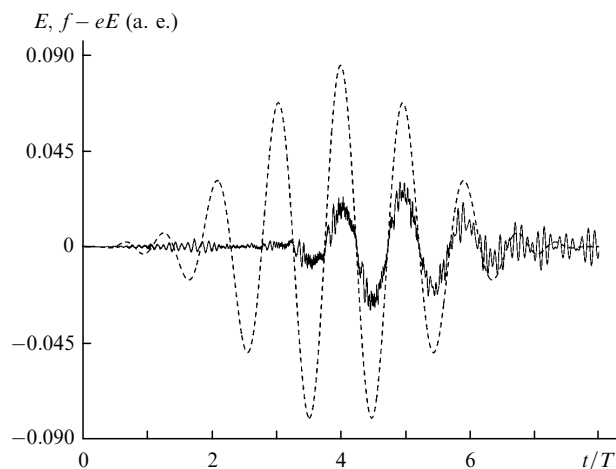


Рис.1. Напряженность $E(t)$ электрического поля возбуждающей волны (штриховая кривая) и полная сила $f(t) = eE(t)$, действующая на электрон (сплошная кривая), в зависимости от времени (в периодах поля T).

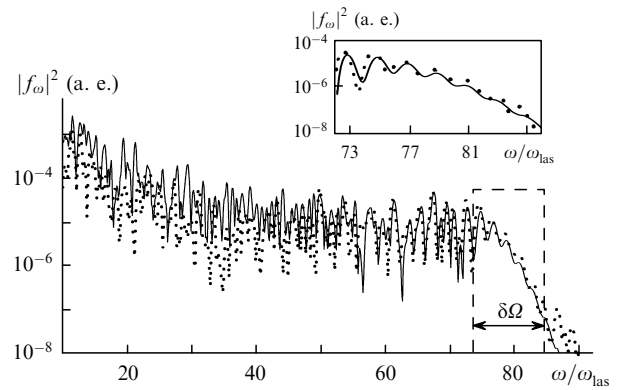


Рис.2. Зависимость от частоты квадрата фурье-образа $|f_\omega|^2$ действующей на электрон силы, полученной путем численного решения уравнения Шредингера (сплошная кривая) и по формулам разработанной модели (пунктирная кривая); ω_{las} – несущая частота возбуждающего излучения.

чески совпадают друг с другом, если интервал $\delta\Omega$ расположен правее середины плато на рис.2.

Интенсивность лазерного излучения, использовавшегося при получении результатов, представленных на рис. 2 и 3, соответствует области надбарьерной ионизации (формально эта область начинается при интенсивности 1.4×10^{14} Вт/см²). Тестовые расчеты показали, что построенная модель обеспечивает удовлетворительное согласие с результатами численного интегрирования уравнения Шредингера, в диапазоне интенсивностей $(0.7 - 3.5) \times 10^{14}$ Вт/см² (в этом диапазоне длительности АИ, рассчитываемых двумя способами, практически совпадают, а амплитуды различаются менее чем на 30%). На нижней границе этой области параметр Келдыша близок к единице, поэтому можно считать, что здесь ионизация уже является туннельной. Однако большая часть указанного диапазона интенсивностей приходится на область, в которой формально ионизация является надбарьерной. По-видимому, основные предположения, лежащие в основе полуклассической модели, также справедливы и в случае надбарьерной ионизации атома.

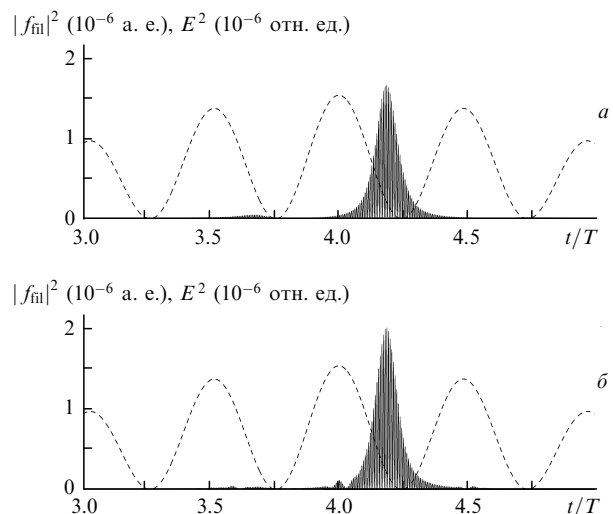


Рис.3. Зависимости квадрата спектрально отфильтрованной силы $|f_{\text{fil}}|^2$ (сплошная кривая) и квадрата напряженности электрического поля E^2 возбуждающего импульса (штриховая кривая) от времени (в периодах поля T), полученные по формулам разработанной модели (а) и путем численного решения уравнения Шредингера (б).

Заметим, что при интенсивностях, превышающих 3.5×10^{14} Вт/см², генерация когерентного высокочастотного излучения оказывается менее эффективной [11], поэтому данный диапазон является наиболее интересным с точки зрения генерации АИ.

Таким образом, разработанный алгоритм расчета, основанный на полуклассической модели КИР, позволяет с удовлетворительной точностью вычислить отклик одноэлектронного атома на поле линейно поляризованного лазерного импульса, длительность которого составляет несколько периодов колебаний поля. Результаты расчетов с помощью разработанной модели, хорошо согласуются с результатами численного решения уравнения Шредингера. При этом вычислительная сложность алгоритма на два и более порядков ниже, чем сложность любого алгоритма численного интегрирования двумерного уравнения Шредингера на сетке при характерных для экспериментов по генерации АИ параметрах возбуждающего импульса.

Работа поддержана РФФИ (грант № 05-02-17627).

Приложение

Алгоритм расчета КИР, сформулированный выше, содержит лишь один сложный этап вычислений – решение алгебраического уравнения (10). В этом уравнении текущее время t (момент рекомбинации) предполагается заданным, неизвестной же величиной является момент ионизации t_{ion} . Формально можно записать уравнение (10) в следующем виде:

$$F(t_{\text{ion}}, b)|_{b=t} = 0. \quad (\text{П1})$$

Уравнение (П1) решается N раз при значениях $b_k = k\Delta t$, где $k = 1, 2, \dots, N$, Δt – шаг по времени, который связан с максимальной частотой излучения, генерируемого в процессе КИР, следующим образом: $\Delta t < \pi/\omega_{\text{max}}$. Число шагов N должно быть достаточным для того, чтобы произведение $N\Delta t$ превышало длительность возбуждающего импульса.

Результаты расчета параметров КИР в атоме водорода почти не меняются при решении уравнения (П1) с погрешностью, превышающей Δt . Таким образом, нет не-

обходимости вычислять t_{ion} с более высокой точностью, и поэтому все корни $t_{\text{ion}}(a_k)$ также можно считать кратными Δt и представить в виде $t_{\text{ion}}(b_k) = m\Delta t$, где m – целое число.

Важно, что функция $F(t_{\text{ion}}b_k)$ непрерывна всюду, кроме точек, в которых электрическое поле равно нулю. Используя это свойство, можно утверждать, что решения $m\Delta t$ удовлетворяют следующему условию:

$$F(\Delta t m, b_k)F(\Delta t(m+1), b_k) \leq 0. \quad (\text{П2})$$

Поэтому корни уравнения (П1) можно искать, проверяя справедливость неравенства (П2) при всех значениях $m < k$. Корни лежат в тех точках, в которых неравенство выполняется. Отсеять решения, связанные с нулевым электрическим полем, можно после вычисления всех значений m , удовлетворяющих неравенству (П2) при фиксированном значении k .

Данный алгоритм решения уравнения (П1) не претендует на то, чтобы быть оптимальным, но позволяет найти все решения уравнения с определенной точностью. Кроме того, структура уравнения (10) и неравенства (П2) дает возможность эффективно реализовать данный алгоритм на современной ЭВМ без явной проверки условного оператора.

1. McPherson A., Gibson G., Jara H., Johann U., Luk T.S., McIntyre I.A., Boyer K., Rhodes C.K. *J. Opt. Soc. Am. B*, **4**, 595 (1987).
2. Ferray M., L'Huillier A., Li X.F., Lompre L.A., Manfray G., Manus C. *J. Phys. B*, **21**, L31 (1988).
3. Drescher M., Hentschel M., Kienberger R., Tempea G., Spielmann Ch., Reider G.A., Corkum P.B., Krausz F. *Science*, **291**, 1923 (2001).
4. Corkum P.B. *Phys. Rev. Lett.*, **71**, 1994 (1993).
5. Lewenstein M., Balcou P., Ivanov M.Yu., L'Huillier A., Corkum P.B. *Phys. Rev. A*, **49**, 2117 (1994).
6. Платоненко В.Т. *Квантовая электроника*, **31**, 55 (2001).
7. Переломов А.М., Попов В.С., Терентьев М.В. *ЖЭТФ*, **7**, 51 (1966).
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика* (М.: Наука, 1989, с. 352).
9. Амосов М.В., Делоне Н.Б., Крайнов В.П. *ЖЭТФ*, **91**, 2013 (1986).
10. Muller H.G. *Phys. Rev. A*, **60**, 1341 (1999).
11. Strelkov V.V., Sterjantov A.F., Shubin N.Yu., Platonenko V.T. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **39**, 577 (2006).
12. Платоненко В.Т., Стержантов А.Ф. *Изв. РАН. Сер. физич.*, **69**, 1249 (2005).