

Атомная физика, физика кластеров и наноструктур

Научная статья

УДК 539.1, 539.18

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18405>

ПРИМЕНЕНИЕ ПАРАБОЛИЧЕСКИХ ВОЛНОВЫХ ПАКЕТОВ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧИ ЭВОЛЮЦИИ АТОМА ВОДОРОДА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ДЛИТЕЛЬНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ

А. С. Зайцев , С. А. Зайцев, Д. С. Зайцева, Е. И. Крамарь

Тихоокеанский государственный университет, г. Хабаровск, Россия

 alzaytsev@togudv.ru

Аннотация. Исследованы особенности применения предложенных нами параболических волновых пакетов (PWP) к решению нестационарного уравнения Шрёдингера (TDSE) для атома водорода, находящегося под действием длительного лазерного импульса. В рамках нестационарного вариационного принципа (TDVP) уравнение TDSE преобразуется в систему дифференциальных уравнений первого порядка относительно параметров PWP. Эффективность предлагаемой схемы исследована на точно решаемом примере импульсов произвольной (в том числе комплексной) амплитуды и длительности. Рассмотрен также случай воздействия ультрафиолетового излучения, для которого выполнено сопоставление наших расчетных данных с результатами других авторов. Перечислены возможные причины наблюдаемого расхождения между результатами применения нашего подхода и результатами использования стандартных методов.

Ключевые слова: параболические волновые пакеты, уравнение Шрёдингера, вариационный принцип, атом водорода, импульсный лазер

Финансирование. Разработка формализма применения PWP для описания действия длительных лазерных импульсов на атом водорода, а также действия на него коротких интенсивных импульсов когерентного экстремального ультрафиолетового (XUV) излучения поддержана Российским научным фондом (проект № 23-72-01072, <https://rscf.ru/project/23-72-01072/>).

Вычислительная часть работы поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках проекта FEME-2024-0005.

Для цитирования: Зайцев А. С., Зайцев С. А., Зайцева Д. С., Крамарь Е. И. Применение параболических волновых пакетов к решению задачи эволюции атома водорода под действием длительных лазерных импульсов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2025. Т. 18. № 4. С. 61–74. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18405>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18405>

APPLICATION OF PARABOLIC WAVE PACKETS TO SOLVING THE EVOLUTION PROBLEM OF A HYDROGEN ATOM EXPOSED TO LONG LASER PULSES

A. S. Zaytsev , S. A. Zaytsev, D. S. Zaytseva, E. I. Kramar

Pacific National University, Khabarovsk, Russia

 alzaytsev@togudv.ru

Abstract. The article studies the features of application of the parabolic wave packets (PWP) (we proposed) to the solution of the Time-Dependent Schrödinger Equation (TDSE) for a hydrogen atom exposed to a long laser pulse. Within the framework of the Time-Dependent Variational Principle, the TDSE is transformed into a system of first-order differential equations with respect to the PWP parameters. The efficiency of the proposed scheme has been studied using an exactly solvable example of pulses of arbitrary (including complex) amplitude and duration. The case of ultraviolet radiation was also considered, for which our calculations were compared with the results obtained by other authors. Possible reasons for the observed discrepancy between the results of applying our approach and those obtained by standard methods were listed.

Keywords: parabolic wave packets, time-dependent Schrödinger equation, time-dependent variational principle, hydrogen atom

Funding: Formalism development of using PWP for description of the action of long laser pulses on a hydrogen atom as well as the action of narrow high-power pulses of coherent XUV on this atom was funded by Russian Science Foundation (project No. 23-72-01072, <https://rscf.ru/project/23-72-01072/>).

The computational part of the work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of Russian Federation within the project FEME-2024-0005.

For citation: Zaytsev A. S., Zaytsev S. A., Zaytseva D. S., Kramar E. I., Application of parabolic wave packets to solving the evolution problem of a hydrogen atom exposed to long laser pulses, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 18 (4) (2025) 61–74. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.18405>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Прогресс, достигнутый в разработке аттосекундных импульсных источников рентгеновского и ультрафиолетового излучения [1], позволяет значительно расширить круг исследуемых явлений в атомах и молекулах, развивающихся во времени. В таких экспериментах оказывается возможным, например, наблюдать динамику сверхбыстрых электронов в режиме реального времени [2, 3], изучать генерацию высоких гармоник [4] и т. п. В свою очередь, необходимость теоретического осмысления новых экспериментальных данных привела к интенсивным исследованиям, направленным на разработку эффективных методов численного решения нестационарного уравнения Шрёдингера (*англ.* Time-Dependent Schrödinger Equation (TDSE)) [5]. В случае слабых полей кулоновские состояния рассеяния, модифицированные лазерным излучением, достаточно точно описываются аналитически в рамках приближения сильного поля [6], подхода Бункина – Федорова [7] и модели Кулона – Волкова [8].

Переход к более мощным лазерным излучениям стимулировал развитие более точных методов, основанных на прямом решении TDSE. Наиболее известный из них – это метод Кранка – Николсона [9], который, по сути, представляет собой конечно-разностную явно-неявную схему с полусуммой и его модификации [10]. Кроме того, получил



развитие подход, основанный на вариационном принципе Дирака — вариационном принципе, зависящем от времени (*англ.* Time-Dependent Variational Principle (TDVP) [11]). Принципу TDVP удовлетворяют параметры пробных функций, используемых для представления решения TDSE. В качестве удачного примера применения TDVP можно указать развитый в работе [12] метод, где решение TDSE ищется в представлении гауссовых волновых пакетов (*англ.* Gaussian Wave Packets (GWP)).

Ранее нами был предложен метод решения TDSE [13], описывающего процесс воздействия линейно-поляризованного лазерного излучения на атом водорода. В основе нашего подхода лежит представление решения в пространстве так называемых параболических волновых пакетов (*англ.* Parabolic Wave Packet (PWP)), параметры которых зависят от времени. В рамках нашего PWP-подхода аксиальная симметрия учтена путем использования параболических координат с осью z , направленной вдоль вектора поляризации. Тем самым изначально трехмерная задача сводится к поиску решения на плоскости (ξ, η) .

К преимуществу метода можно отнести его способность находить решение в неограниченном пространстве, так что численная процедура свободна от граничных явлений в виде нефизического отражения, присущего подходам, в которых границы области, где ищется решение, задаются явно.

Вместе с тем метод имеет ряд недостатков, главным из которых является требование к порядку используемой численной схемы: этот порядок способен обеспечить точность вычислений, необходимую для устойчивой работы процедуры. Так, например, в случае применения метода конечных элементов или сеточного метода дискретизации пространства наиболее часто в задачах эволюции используется довольно стабильный метод Кранка — Николсона [9]. К сожалению, этот метод оказался недостаточно точным для применения в нашем случае; в результате уже на первых шагах работы процедуры матрица уравнения становилась сингулярной.

В данном исследовании наши усилия были направлены на расширение возможностей PWP-подхода, чтобы сделать его применимым к случаю импульсов продолжительностью около 10 оптических циклов. Это оказалось возможным в результате использования 13-стадийного метода Дормана — Принса 8-го порядка [14], относящегося к методам Рунге — Кутты. Разработанная численная схема протестирована на примере с комплексным импульсом, допускающим точное решение в виде единственной функции PWP. Примечательно, что через выбор значений параметров импульса можно получить решение, которое время от времени перестает быть нормируемым, что выходит за рамки стандартных граничных условий и может служить дополнительной проверкой эффективности работы численной схемы.

Мы также выполнили расчеты спектров фотоэлектронов, соответствующих импульсам различной длительности, и сопоставили наши расчетные результаты с полученными ранее другими авторами. В частности, были рассмотрены случаи короткого и интенсивного импульса когерентного экстремального ультрафиолетового (*англ.* eXtreme UltraViolet (XUV)) излучения [15], а также импульсов длительностью 1 и 7 оптических циклов [16, 17]. Полное согласие с результатами других авторов, достигнутое в нашей статье [13] для коротких импульсов, длительность которых не превышала нескольких оптических циклов, нарушается при переходе к импульсам большей длительности. В частности, спектр фотоионизации, рассчитанный стандартным методом, для такого излучения демонстрирует относительно регулярные осцилляции с ростом энергии электрона. В то же время, согласно нашим расчетам, кривая поведения спектра электрона, выбитого импульсом, характеризуется несколькими максимумами с последующим монотонным убыванием. Для определения причин такого расхождения мы исследовали погрешность нашей численной схемы, а также сходимость результатов с уменьшением шага по времени и с повышением размеров базисного набора.

Атомные единицы (a.u./a.e.) $\hbar = e = m_e = 1$ используются везде, если не оговаривается иное.

Квантовомеханическая теория рассматриваемого явления

Рассмотрим TDSE вида

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = \hat{\mathcal{H}}(t) \Psi(t), \quad (1)$$

где полный гамильтониан системы

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{H}_C + \hat{U}(t), \quad (2)$$

представлен суммой кулоновского гамильтониана \hat{H}_C и энергии возмущения вызванного лазерным полем.

Кулоновский гамильтониан определяется выражением

$$\hat{H}_C = -\frac{1}{2M} \nabla_r^2 + \frac{Z}{r}, \quad (3)$$

где \mathbf{r} – радиус-вектор частицы массой M ; для атома водорода имеем $M = 1$ и заряд частицы $Z = -1$.

В случае линейно-поляризованного лазерного импульса естественным выбором направления оси z будет направление, параллельное вектору поляризации.

Таким образом, оператор возмущения в дипольном приближении и калибровке длины принимает вид

$$\hat{U}(t) = E(t)z, \quad (4)$$

где $E(t)$ – поле.

Аксиальная симметрия диктует применение параболических координат: ξ, η, ϕ , которые связаны с декартовыми согласно формулам

$$x = \sqrt{\xi\eta} \cos \phi, y = \sqrt{\xi\eta} \sin \phi, z = \frac{1}{2}(\xi - \eta). \quad (5)$$

Таким образом, TDSE, выраженное формулой (1), сводится к следующему уравнению на плоскости (ξ, η) :

$$i \frac{(\xi + \eta)}{4} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, \xi, \eta) = \left[-\frac{1}{2M} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \frac{Z}{2} + \frac{E(t)}{8} (\xi^2 - \eta^2) \right] \times \Psi(t, \xi, \eta). \quad (6)$$

Параболические волновые пакеты. Решение уравнения (1) предлагается искать в виде следующего разложения [13]:

$$\Psi(t) = \sum_{\kappa} \sum_{j=1}^N u_j^{\kappa}(t), \quad (7)$$

по базисным функциям

$$\langle \xi, \eta, \phi | u^{\kappa}(t) \rangle = \frac{e^{i\kappa\phi}}{\sqrt{2\pi}} [\xi\eta]^{\frac{\lambda}{2}} g(t, \xi, \eta), \lambda = |\kappa|, \quad (8)$$

где

$$g(t, \xi, \eta) = \exp[\gamma(t) - a(t)\xi - b(t)\eta]. \quad (9)$$

Пробные функции (9) мы назвали параболическими волновыми пакетами (PWP) по аналогии с известными в литературе гауссовыми волновыми пакетами (GWP) [12].

Вариационный принцип. В случае использования базисного набора из N векторов (9) волновую функцию системы будет представлять вектор длины $3N$, компонентами которого являются нелинейные параметры

$$\{\gamma_j(t), a_j(t), b_j(t)\}, j = 1, 2, \dots, N,$$



упорядоченные следующим образом:

$$\mathbf{q} = \begin{bmatrix} \{\gamma_1(t), \gamma_2(t), \dots, \gamma_N(t)\}, \\ \{a_1(t), a_2(t), \dots, a_N(t)\}, \\ \{b_1(t), b_2(t), \dots, b_N(t)\} \end{bmatrix}. \quad (10)$$

Таким образом, зависимость от времени параметров PWP определяет эволюцию атомной системы. Уравнение относительно компонент вектора параметров получается подстановкой разложения (7) в уравнение (1) с последующим применением вариационного принципа Маклачлана (TDVP) [11].

В результате исходное TDSE преобразуется в систему обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка относительно параметров (см., например, статью [12]):

$$iM\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{v}. \quad (11)$$

Здесь M – положительно определенная эрмитова матрица размером $3N \times 3N$, элементы которой определяются формулой

$$M_{jj'} = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} \left| \frac{\partial \Psi}{\partial q_{j'}} \right. \right\rangle, \quad (12)$$

где \mathbf{v} – комплексный вектор длины $3N$ со следующими элементами:

$$v_j = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial q_j} \left| \hat{H} \Psi \right. \right\rangle. \quad (13)$$

Начальные значения параметров $q(0)$ определяются путем диагонализации гамильтониана (3) для атома водорода.

Точно решаемый случай. В развитии нового численного подхода особое значение имеют эталонные решения, которые играют роль теста эффективности предлагаемой схемы. В качестве такового мы предложили следующее вспомогательное поле [13]:

$$E(t) = F(t) + i \frac{s(t)}{r}, \quad (14)$$

где $F(t) = 0$ при $t \leq 0$ и

$$s(t) = \int_0^t F(t') dt', \quad (15)$$

допускает точное решение в виде единственного PWP (9). Действительно, если подставить выражение (9) в уравнение (6), то получим уравнение вида

$$i \frac{(\xi + \eta)}{4} \frac{\partial}{\partial t} g(t, \xi, \eta) = -\frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \xi \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} \eta \frac{\partial}{\partial \eta} + 1 - \frac{F(t)}{4} (\xi^2 - \eta^2) - i \frac{s(t)}{2} \right] \times \\ \times g(t, \xi, \eta). \quad (16)$$

Из уравнения (16) следует система уравнений относительно параметров PWP:

$$a(t) + b(t) = 1,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} a(t) = \frac{i}{2} F(t),$$

$$\frac{\partial}{\partial t} b(t) = -\frac{i}{2} F(t), \quad (17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \gamma(t) = s(t) + 2ia^2(t) = -s(t) + 2ib^2(t).$$

Наконец, полагая для основного состояния атома водорода

$$a(0) = b(0) = \frac{1}{2}, \quad \gamma(0) = \frac{1}{2} \ln 2,$$

получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} a(t) &= \frac{1}{2} [1 + is(t)], \\ b(t) &= \frac{1}{2} [1 - is(t)], \\ \gamma(t) &= \frac{1}{2} \ln 2 + \frac{i}{2} \left[t - \int_0^t s^2(t') dt' \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

Следует отметить, что функция $F(t)$ может быть произвольной, а это означает, что к такому импульсу с произвольными значениями несущей частоты и амплитуды теория возмущений может оказаться неприменимой.

В случае эталонного решения (14), (15), допускающего существование решения в виде единственного PWP (см. формулу (9)), (3×3) -матрица M (12) принимает следующий явный вид:

$$M = \frac{e^{\omega}}{4u^2v^2} \begin{bmatrix} u+v & -\frac{u+2v}{u} & -\frac{2u+v}{v} \\ -\frac{u+2v}{u} & 2\frac{u+3v}{u^2} & 2\frac{u+v}{uv} \\ -\frac{2u+v}{v} & 2\frac{u+v}{uv} & 2\frac{3u+v}{v^2} \end{bmatrix}, \quad (19)$$

где $u = a + a^*$, $v = b + b^*$ и $\omega = \gamma + \gamma^*$ (звездочкой обозначена операция комплексного сопряжения).

В свою очередь выражение (13) для вектора \mathbf{v} также принимает простой вид:

$$\mathbf{v} = \frac{e^{\omega}}{2uv} \begin{bmatrix} -1 + a + b - \frac{2a^2 - is(t)}{2u} - \frac{2b^2 - is(t)}{2v} + \frac{E(t)}{2} \left(\frac{1}{u^2} - \frac{1}{v^2} \right) \\ \frac{1-a-b}{u} + \frac{2a^2 - is(t)}{u^2} + \frac{2b^2 + is(t)}{2uv} - \frac{E(t)}{2} \left(\frac{3}{u^3} - \frac{1}{uv^2} \right) \\ \frac{1-a-b}{v} + \frac{2a^2 - is(t)}{2uv} + \frac{2b^2 + is(t)}{v^2} - \frac{E(t)}{2} \left(\frac{1}{u^2v} - \frac{3}{v^3} \right) \end{bmatrix}. \quad (20)$$

Заметим, однако, что матричное уравнение (11) не сводится к системе (17) символьными преобразованиями, так что для проверки работоспособности подхода, основанного на уравнениях (11) – (13), в нашем распоряжении остается вариант численной схемы [13]. Эффективность нашего подхода мы проверяем на примерах, представленных в следующих разделах.

Амплитуда ионизации. Решение TDSE (1) можно использовать для получения информации об энергетическом и угловом распределениях электронов, выбитых из атома лазерным импульсом. В нашем случае исследуемой характеристикой является амплитуда ионизации, определяемая следующим образом.

Возмущение $\hat{U}(t)$ обращается в нуль при $t > t_f$, так что решение $\Psi(t)$ формально можно разложить по собственным функциям гамильтониана \hat{H}_C :

$$\Psi(t, \mathbf{r}) = \int d\mathbf{k} C(\mathbf{k}) \psi_k^-(\mathbf{r}) e^{-i\frac{k^2}{2M}(t-t_f)} + \psi_b(t-t_f, \mathbf{r}), \quad (21)$$

где ψ_k^- – волновая функция состояния непрерывного спектра атомной системы,



нормированная по импульсу на δ -функцию; ψ_b обозначает вклад всех связанных состояний атома.

Коэффициенты $C(\mathbf{k})$ в выражении (21) определяют амплитуду перехода электрона в состояние континуума ψ_k^- , а именно — амплитуду ионизации.

Как показано в работе [18], для извлечения амплитуды $C(\mathbf{k})$ достаточно подействовать оператором функции Грина кулоновской системы

$$\hat{G}_c^{(+)}(Z, M, k) \equiv \left[\frac{k^2}{2M} + i\varepsilon - \hat{H}_c \right]^{-1}$$

на решение $\Psi(t)$ в конце действия импульса, т. е. в момент времени $t = t_f$.

Действительно, из свойств функции Грина при $r \rightarrow \infty$ [19] следует, что искомая амплитуда будет фигурировать в асимптотическом выражении для $\hat{G}_c^{(+)}\Psi(t_f)$ в виде коэффициента при расходящейся кулоновской волне:

$$\left\langle \mathbf{r} \left| \hat{G}_c^{(+)}(Z, M, k) \right| \Psi(t_f) \right\rangle \approx -\sqrt{2\pi} C(k\hat{\mathbf{r}}) \frac{\exp\{i[kr - \beta \ln(2kr)]\}}{r}, \quad (22)$$

где β — параметр Зоммерфельда, $\beta = ZM/k$.

С другой стороны, в работе [13] нами было показано, что

$$\left\langle \mathbf{r} \left| \hat{G}_c^{(+)}(Z, M, k) \right| \frac{g_j(t, \xi, \eta)}{\sqrt{2\pi}} \right\rangle \approx -\sqrt{2\pi} C_j(k\hat{\mathbf{r}}) \frac{\exp\{i[kr - \beta \ln(2kr)]\}}{r}, \quad (23)$$

где

$$\begin{aligned} C_j(\mathbf{k}) \equiv C_j^0(\mathbf{k}) = & \frac{M}{\pi} \frac{\exp\{\gamma_j\}}{[4a_j b_j]^2} \Gamma(i\beta + 1) e^{-\frac{\pi\beta}{2}} \frac{1}{c_j + s_j} \left(\frac{(1+p_j)(1+q_j)}{c_j + s_j} \right)^{i\beta} \times \\ & \times \left\{ a_j + b_j + b_j \left(\frac{1-p_j}{1+p_j} \right) \left[1 + (1+i\beta) \frac{4p_j}{(1-p_j)^2} \frac{c_j}{c_j + s_j} \right] + \right. \\ & \left. + a_j \left(\frac{1-q_j}{1+q_j} \right) \left[1 + (1+i\beta) \frac{4q_j}{(1-q_j)^2} \frac{s_j}{c_j + s_j} \right] \right\} \Bigg|_{t=t_f}. \end{aligned} \quad (24)$$

причем

$$\begin{aligned} p &= -ik/2a, \quad q = -ik/2b, \\ c &= (1-p)(1+q)\cos^2(\theta/2), \\ s &= (1+p)(1-q)\sin^2(\theta/2), \end{aligned} \quad (25)$$

$$c_v^{(n,\lambda)} = (-1)^v \frac{(n+\lambda)!}{(n-v)!(v+\lambda)!v!}. \quad (26)$$

Таким образом, амплитуда ионизации представляется в виде суммы

$$C(\mathbf{k}) = \sum_{j=1}^N C_j(\mathbf{k}). \quad (27)$$

В свою очередь, вероятность ионизации или спектр фотоэлектрона вычисляются путем интегрирования квадрата амплитуды по всем возможным углам вылета электрона:

$$\frac{dP}{dE} = k \int |C(\mathbf{k})|^2 d\Omega_k. \quad (28)$$

Численная реализация решения матричного уравнения

Решение матричного уравнения (11) в настоящей работе реализовано методом Рунге — Кутты 8-го порядка с постоянной длиной шага, зависящей от размеров матрицы.

Дифференциальная система (11) является жесткой, что приводит к необходимости увеличивать число шагов по мере расширения размеров базиса. Мы полагаем, что это происходит потому, что показатели экспонент $a_j(t)$, $b_j(t)$, отвечающие разным g_j (см. выражение (9)), как показывает опыт, могут различаться на несколько порядков. При этом различие в параметрах нарастает довольно быстро. В результате даже при небольших значениях N ($N \approx 10$) матрица уравнения становится сингулярной уже на первых шагах работы процедуры, и процесс решения аварийно завершается.

Вместе с тем нам удалось обеспечить точность вычислений, необходимую для устойчивой работы указанной процедуры. Это оказалось возможным в результате использования 13-стадийного метода Дормана – Принса 8-го порядка [14]. Избранная схема позволила нам получить решение также в случае импульсов продолжительностью около 10 оптических циклов. Была исследована погрешность вычислений решения, а также сходимость метода как с повышением размеров базиса, так и по мере увеличения числа шагов (уменьшения длины шага) по времени.

Результаты и их обсуждение

Точно решаемые задачи. Особый интерес представляет случай, когда напряженность внешнего поля лазера сопоставима с напряженностью внутриатомного поля. Поскольку теория возмущений оказывается неприменимой, такая ситуация служит удобным тестом для нашего численного подхода.

Мы рассмотрели два точно решаемых примера вспомогательного поля $E(t)$ (14), когда функция $F(t)$ следует разным выражениям:

$$\text{I. } F_I(t) = \sin(t); \text{ II. } F_{II}(t) = [(1 + i)/2] \sin(t).$$

Как следует из системы уравнений (18), в I примере функция $s(t)$ вещественная, так что

$$\text{Re}[(a(t))] = \text{Re}[(b(t))] = 1/2,$$

и таким образом решение $g(t, \xi, \eta)$ остается нормируемым в каждый момент времени. Сохранение единичной нормы – это одно из стандартных требований к решению TDSE для изначально связанного состояния квантовой системы.

Во II примере амплитуда импульса комплексная, что приводит к необычному поведению вещественной части параметра $a(t)$, которая теперь обращается в нуль в точках $t_j = \pi(2j + 1)$. Следовательно, в эти моменты времени решение $g(t, \xi, \eta)$ перестает быть нормируемым по переменной ξ . Это отклонение от поведения, характерного для квантовых систем, может служить дополнительным тестом устойчивости работы численной схемы, основанной на уравнении (11).

Результаты абсолютных отклонений рассчитанных параметров $\gamma(t)$, $a(t)$ и $b(t)$ от их точных значений (18) представлены на рис. 1. В вычислениях использовались различные версии схем: Рунге – Кутты 4-го порядка и Дормана – Принса. Из результатов, показанных на рис. 1, следует, что точность расчетов ожидаемо возрастает на 6 – 8 порядков при переходе к схеме Дормана – Принса.

К основным результатам следует отнести стабильность величины погрешности с течением времени, что делает возможным использование нашего подхода в сочетании со схемой Дормана – Принса для импульсов большой длительности. Наконец, полученные результаты могут служить доказательством работоспособности метода применительно к лазерному излучению высокой интенсивности, когда ни одно из полей (ни атомное, ни внешнее) не может быть рассмотрено в рамках теории возмущений.

Ультрафиолетовое излучение. Тестирование работоспособности PWP-подхода было выполнено также на примере поля слабой интенсивности, допускающего применение теории возмущений. В частности, был рассчитан спектр фотоэлектронов, покидающих атом водорода под действием лазерного импульса следующей формы [16, 17]:

$$E(t) = E_0 \sin[\omega(t - t_0)] \sin^2 \frac{\pi t}{T_f}, \quad t_0 = \frac{T_f - \pi}{2}, \quad 0 \leq t \leq T_f, \quad (29)$$

где $\omega = 1,71$; $T_f = 3,67$ либо $25,72$ для случаев одного либо семи оптических циклов, соответственно.

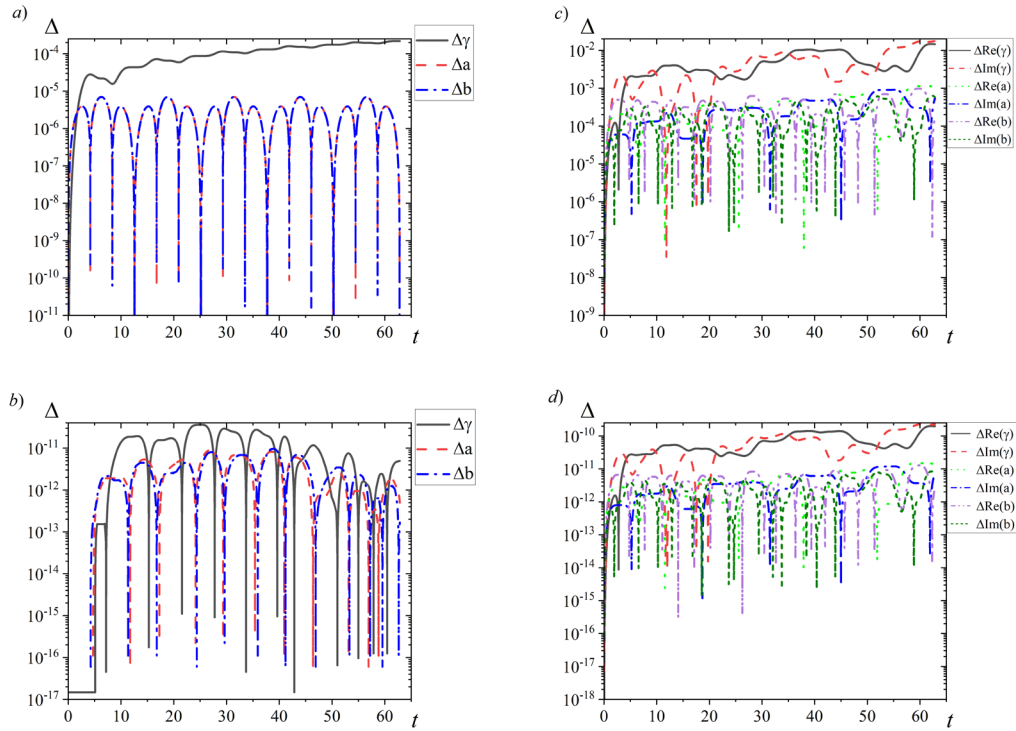


Рис. 1. Временная динамика абсолютных отклонений Δ параметров γ , a и b (решений системы (12) с учетом (19) и (20)) от своих точных значений (18): использованы схемы Рунге – Кутты 4-го порядка (a, c) и Дормана – Принса (b, d). Соответствующий PWP (9) удовлетворяет уравнению (16) с импульсом (14), (15), где функция $F(t)$ следует выражениям $F_I(t)$ (a, b) и $F_{II}(t)$ (c, d)

Амплитуду E_0 поля, линейно-поляризованного вдоль оси z , полагали равной 0,05 (малой, по сравнению со значением напряженности внутриатомного поля).

Результаты расчетов вероятности ионизации представлены на рис. 2, a и b, соответственно для значений продолжительности импульса в один либо семь оптических циклов (полученные нами данные сравниваются также с результатами работ [16, 17]).

В случае импульса длительностью в один цикл, форма которого представлена выражением (29), использован базисный набор PWP (8) размером $N = 54$. При этом была исследована зависимость результатов от длины шага h , который варьировали в интервале $7,34 \cdot (10^{-5} - 10^{-6})$.

Как следует из рис. 2, a, сходимость плотности вероятности ионизации достигается довольно быстро: соответствующие кривые становятся неразличимыми начиная с $h = 7,34 \cdot 10^{-5}$. Для сравнения мы также привели на рис. 2, a результаты расчетов, полученные в статье [16]. Плотность вероятности ионизации для 7-циклового импульса, по сравнению с результатами работы [17], также представлены на рис. 2, b. Свойства сходимости в данном случае были исследованы с размерами базисного набора $N = 54$ и 78. С учетом увеличения длительности импульса начальное значение шага по времени здесь также было увеличено до $h = 1,29 \cdot 10^{-4}$. Мы довели значение h до $2,57 \cdot 10^{-5}$. Как видно на рис. 2, b, сходимость наступает уже при $h = 1,29 \cdot 10^{-4}$. Аналогичная картина наблюдается и с повышением числа используемых PWP, которое в наших расчетах достигало 78.

Наконец, нами был рассмотрен случай воздействия на атом водорода импульсом длительностью 9 циклов [15]:

$$E(t) = f(t) E_0 \sin(\omega t) \quad (30)$$

с довольно распространенной формой огибающей $f(t)$:

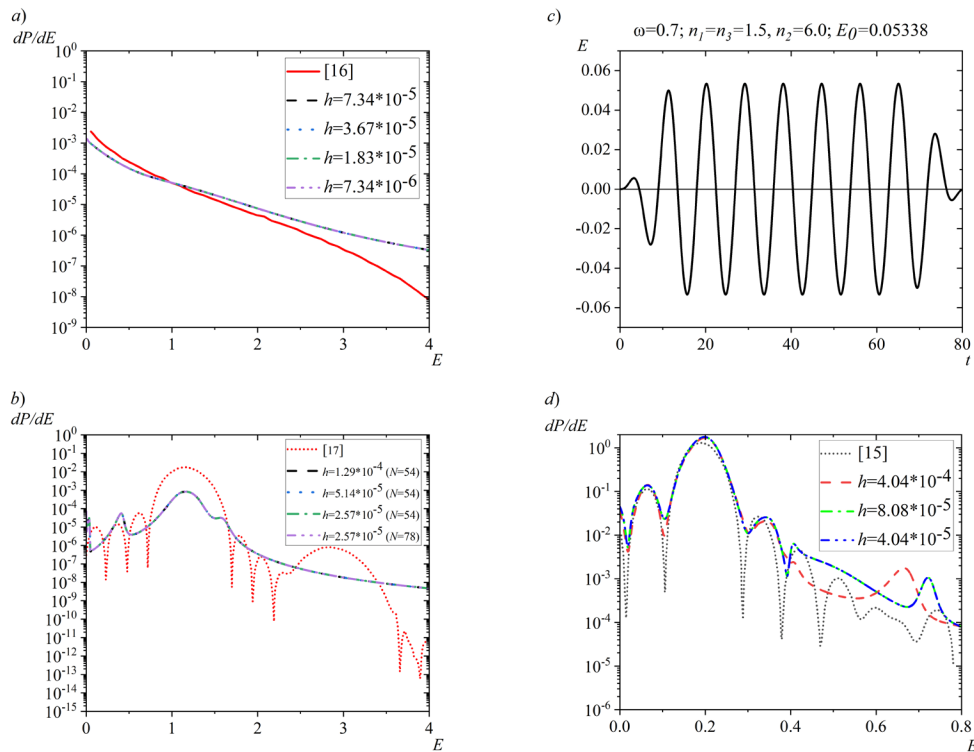


Рис. 2. Графическое представление результатов расчетов плотности вероятности ионизации (28) под действием импульсов XUV (29) (a, b) и (30) с огибающей (31) (d); данные получены с применением схемы Дормана – Принса в зависимости от шага по времени:

a – для импульса длительностью 1 цикл ($T_f = 3,67$), b – 7 циклов ($T_f = 25,72$); c – форма импульса длительностью 9 циклов с соответствующими параметрами, d – полученная плотность вероятности для этого (c) импульса. Для сравнения приведены соответствующие результаты из работ [16] (a), [17] (b) и [15] (d)

$$f(t) = \begin{cases} \sin^2\left(\frac{\pi t}{2n_1 T}\right), & 0 \leq t \leq n_1 T, \\ 1, & n_1 T \leq t \leq (n_1 + n_2) T, \\ \sin^2\left(\frac{\pi t}{2n_3 T}\right), & (n_1 + n_2) T \leq t \leq t_f, \end{cases} \quad (31)$$

где T – период одного цикла центральной частоты, $T = 2\pi/\omega$; n_1, n_2, n_3 – параметры формы, которые задают количество циклов, отвечающих фазам нарастания, плато и спада импульса, соответственно.

В итоге величина $t_f = (n_1 + n_2 + n_3)T$ определяет общую длительность импульса. Мы использовали характерные значения параметров [15]: $n_1 = n_3 = 1,5$; $n_2 = 6,0$. Амплитуда и частота импульса также взяты из работы [15]: $\omega = 0,7$; $E_0 = 0,05338$. Форма импульса представлена на рис. 2, c.

В данном случае мы также использовали 54 PWP (см. формулу (8)). Из результатов, полученных для вероятности ионизации (рис. 2, d), следует, что сходимость достигается при длине шага по времени $h = 8,08 \cdot 10^{-5}$; отметим, что эффект от дальнейшего уменьшения шага пренебрежимо мал.

Во всех случаях, рассмотренных в данном разделе, полученные нами результаты в целом согласуются с соответствующими результатами других авторов.

Анализ отличий от результатов литературных источников. Наблюдаемые явные различия требуют анализа их возможного происхождения. Начнем с того, что в рассчитанных нами ранее случаях ультракоротких импульсов длительностью в полцикла [13] было



достигнуто полное согласие с результатами работы [11]. Таким образом, естественно предположить, что расхождения, наблюдаемые при переходе к импульсам большей длительности (большее число циклов), объясняются потерей точности с соответствующим ростом числа шагов по времени. Чтобы исключить эту возможную причину, мы воспользовались схемой Дормана – Принса, обеспечивающей более высокую точность (на 6 – 8 порядков), чем метод Рунге – Кутты 4-го порядка (см. рис. 1); последний был использован нами в работе [13].

В качестве второй возможной причины можно указать неудачный выбор шага по времени. Таким образом, мы включили в расчеты исследование сходимости с уменьшением шага по времени, подобное проведенному в работе [13]. Напомним, что хорошее соответствие наших расчетов результатам статьи [10] для 4-циклового импульса, достигнутое при шаге 0,0001 а.е., нарушается по мере уменьшения шага. Заметим, что в наших расчетах (как в прежней работе [13], так и в этой работе) была достигнута сходимость по шагу. С другой стороны, мы не встречали подобного исследования в упомянутых выше работах.

Наконец, отдельного обсуждения заслуживает представление угловой части решения. Заметим, что при использовании сферических координат, для описания решения зачастую приходится использовать довольно большое (от 15 до 60) количество парциальных волн. Иными словами, угловая зависимость имеет вид полиномов, включающих функции $\sin\theta$ и $\cos\theta$ довольно высокой степени. В нашем представлении, как следует из выражений (24) и (25) для амплитуды ионизации, зависимость этой амплитуды от функций угла θ является дробно-рациональной, и ее не всегда удастся аппроксимировать с помощью даже того количества полиномов Лежандра, которое характерно для расчетов, использующих сферические координаты. Таким образом, в общем случае невозможно провести сопоставление нашего метода со стандартными подходами.

Заключение

В проведенном исследовании наши усилия были направлены на расширение возможностей нашего PWP-метода [13], чтобы сделать эффективным его применение к случаю импульсов длительностью около 10 оптических циклов. Это оказалось возможным в результате использования 13-стадийного метода Дормана – Принса 8-го порядка [14]. Разработанная численная схема протестирована на примере модельного импульса, допускающего точное решение в виде единственного PWP. Примечательно, что путем выбора значений параметров импульса можно получить решение, которое время от времени перестает быть нормируемым, что выходит за рамки стандартных граничных условий и тем самым может служить дополнительной проверкой эффективности работы численной схемы.

Мы также выполнили расчеты спектров фотоэлектронов для слабых полей, рассмотренных другими авторами. В частности, были получены результаты для импульсов длительностью в 1 [16], 7 [16, 17] и 9 [15] оптических циклов.

Несмотря на общее согласие наших расчетов с результатами работ [15 – 17], имеют место существенные различия. Например, спектр фотоионизации, рассчитанный другими авторами, демонстрирует осцилляции с ростом энергии электрона. В нашем случае спектр ограничивается несколькими максимумами, после чего наблюдается его монотонное убывание. Мы полагаем, что для такого отличия имеются две основные причины. Во-первых, в нашем PWP-подходе и в стандартных методах, использующих сферические координаты, описание угловой части решения радикально различаются. В PWP-амплитуде фигурируют дробно-рациональные выражения, содержащие функции $\sin\theta$ и $\cos\theta$, тогда как в стандартных методах применяется разложение амплитуды по полиномам Лежандра.

Таким образом, сопоставление этих двух подходов затруднено, например тем, что разложение PWP-амплитуды может потребовать неограниченного числа полиномов Лежандра. Кроме того, наши расчеты включают исследование сходимости результатов с существенным уменьшением шага по времени. К сожалению, подобное исследование отсутствует в работах [15 – 17], так что сопоставление методов на этом уровне пока невозможно.

В своих будущих работах мы планируем выполнить детальное (насколько это возможно) сопоставление методов, для чего рассмотрим различные аспекты реализации стандартных подходов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gassert H., Chuluunbaatar O., Waitz M., et al. Agreement of experiment and theory on the single ionization of helium by fast proton impact // *Physical Review Letters*. 2016. Vol. 116. No. 7. P. 073201.
2. Krausz F., Ivanov M. Attosecond physics // *Reviews of Modern Physics*. 2009. Vol. 81. No. 1. Pp. 163–234.
3. Hütten K., Mittermair M., Stock S. O., et al. Ultrafast quantum control of ionization dynamics in krypton // *Nature Communications*. 2018. Vol. 9. 19 February. P. 719.
4. Cui S., He P.-L., He F. Ionization of hydrogen atoms in attosecond pulse trains and strong infrared laser pulses // *Physical Review A*. 2016. Vol. 94. No. 5. P. 053401.
5. Fareed M. A., Strelkov V. V., Thiré N., Mondal S., Schmidt B. E., Légaré F., Ozaki T. High-order harmonic generation from the dressed autoionizing states // *Nature Communications*. 2017. Vol. 8. 17 July. P. 16061.
6. Keldysh L. V. Ionization in the field of a strong electromagnetic wave // *Journal of Experimental and Theoretical Physics (USSR)*. 1965. Vol. 20. No. 5. Pp. 1307–1314.
7. Bunkin F. V., Fedorov M. V. Bremsstrahlung in a strong radiation field // *Journal of Experimental and Theoretical Physics (USSR)*. 1966. Vol. 22. No. 4. Pp. 844–847.
8. Jain M., Tzoar N. Compton scattering in the presence of coherent electromagnetic radiation // *Physical Review A*. 1978. Vol. 18. No. 2. Pp. 538–545.
9. Crank J., Nicolson P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type // *Advances in Computational Mathematics*. 1996. Vol. 6. No. 1. Pp. 207–226.
10. Grum-Grzhimailo A. N., Abeln B., Bartschat K., Weffen D., Urness T. Ionization of atomic hydrogen in strong infrared laser fields // *Physical Review A*. 2010. Vol. 81. No. 4. P. 043408.
11. McLachlan A. D. A variational solution of the time-dependent Schroedinger equation // *Molecular Physics*. 1964. Vol. 8. No. 1. Pp. 39–44.
12. Rowan K., Schatzki L., Zaklama T., Suzuki Y., Watanabe K., Varga K. Simulation of a hydrogen atom in a laser field using the time-dependent variational principle // *Physical Review E*. 2020. Vol. 101. No. 2. P. 023313.
13. Zaytsev A., Zaytseva D., Zaytsev S., Ancarani L. U., Popov Y., Kouzakov K. Parabolic wave packets for time propagation of atomic hydrogen in an electric field of short laser pulses // *The European Physical Journal Plus*. 2024. Vol. 139. No. 2. P. 199.
14. Хайпер Э., Нёрсерт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. Пер. с англ. М.: Мир, 1990. 512 с.
15. Bartschat K., Venzke J., Grum-Grzhimailo A. N. Pulse-shape effects in ionization of atomic hydrogen by short-pulse XUV intense laser radiation: A sensitivity study // *Physical Review A*. 2015. Vol. 91. No. 5. P. 053404.
16. Della Picca R., Fiol J., Fainstein P. D. Factorization of laser-pulse ionization probabilities in the multiphotonic regime // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. 2013. Vol. 46. No. 17. P. 175603.
17. Gersbacher R., Broad J. T. J-Matrix time propagation of atomic hydrogen in attosecond fields // *Scientific Reports*. 2022. Vol. 12. 01 July. P. 11155.
18. Palacios A., McCurdy C. W., Rescigno T. N. Extracting amplitudes for single and double ionization from a time-dependent wave packet // *Physical Review A*. 2007. Vol. 76. No. 4. P. 043420.
19. Мессиа А. Квантовая механика. Пер. с франц. В 2 т. Т. 2. М.: Наука, 1979. 583 с.

REFERENCES

1. Gassert H., Chuluunbaatar O., Waitz M., et al., Agreement of experiment and theory on the single ionization of helium by fast proton impact, *Phys. Rev. Lett.* 116 (7) (2016) 073201.
2. Krausz F., Ivanov M., Attosecond physics, *Rev. Modern Phys.* 81 (1) (2009) 163–234.
3. Hütten K., Mittermair M., Stock S. O., et al., Ultrafast quantum control of ionization dynamics in krypton, *Nat. Commun.* 9 (19 Febr) (2018) 719.
4. Cui S., He P.-L., He F., Ionization of hydrogen atoms in attosecond pulse trains and strong infrared laser pulses, *Phys. Rev. A*. 94 (5) (2016) 053401.

5. Fareed M. A., Strelkov V. V., Thiré N., et al., High-order harmonic generation from the dressed autoionizing states, Nat. Commun. 8 (17 July) (2017) 16061.
6. Keldysh L. V., Ionization in the field of a strong electromagnetic wave, JETP. 20 (5) (1965) 1307–1314.
7. Bunkin F. V., Fedorov M. V., Bremsstrahlung in a strong radiation field, JETP. 22 (4) (1966) 844–847.
8. Jain M., Tzoar N., Compton scattering in the presence of coherent electromagnetic radiation, Phys. Rev. A. 18 (2) (1978) 538–545.
9. Crank J., Nicolson P., A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type, Adv. Comput. Math. 6 (1) (1996) 207–226.
10. Grum-Grzhimailo A. N., Abeln B., Bartschat K., et al., Ionization of atomic hydrogen in strong infrared laser fields, Phys. Rev. A. 81 (4) (2010) 043408.
11. McLachlan A. D., A variational solution of the time-dependent Schrodinger equation, Mol. Phys. 8 (1) (1964) 39–44.
12. Rowan K., Schatzki L., Zaklama T., et al., Simulation of a hydrogen atom in a laser field using the time-dependent variational principle, Phys. Rev. E. 101 (2) (2020) 023313.
13. Zaytsev A., Zaytseva D., Zaytsev S., et al., Parabolic wave packets for time propagation of atomic hydrogen in an electric field of short laser pulses, Eur. Phys. J. Plus. 139 (2) (2024) 199.
14. Hairer E., Wanner G., Nørsett S. P., Solving ordinary differential equations: I. Nonstiff problems (Springer Series in Computational Mathematics, Vol. 8). Springer Berlin, Heidelberg, 1993.
15. Bartschat K., Venzke J., Grum-Grzhimailo A. N., Pulse-shape effects in ionization of atomic hydrogen by short-pulse XUV intense laser radiation: A sensitivity study, Phys. Rev. A. 91 (5) (2015) 053404.
16. Della Picca R., Fiol J., Fainstein P. D., Factorization of laser-pulse ionization probabilities in the multiphotonic regime, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 46 (17) (2013) 175603.
17. Gersbacher R., Broad J. T., J-Matrix time propagation of atomic hydrogen in attosecond fields, Sci. Rep. 12 (01 July) (2022) 11155.
18. Palacios A., McCurdy C. W., Rescigno T. N., Extracting amplitudes for single and double ionization from a time-dependent wave packet, Phys. Rev. A. 76 (4) (2007) 043420.
19. Messiah A., Quantum mechanics (Dover books on physics), Dover Publications, New York, USA, 2014. 1152 p.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЗАЙЦЕВ Александр Сергеевич — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Тихоокеанского государственного университета, г. Хабаровск, Россия.
680035, Россия, г. Хабаровск, Тихоокеанская ул., 136.
alzaytsev@togudv.ru
ORCID: 0009-0004-6895-6436

ЗАЙЦЕВ Сергей Александрович — доктор физико-математических наук, профессор Высшей школы физико-математических наук Тихоокеанского государственного университета, г. Хабаровск, Россия.
680035, Россия, г. Хабаровск, Тихоокеанская ул., 136.
zaytsevs@togudv.ru
ORCID: 0000-0003-3771-3541

ЗАЙЦЕВА Дарья Сергеевна — младший научный сотрудник Тихоокеанского государственного университета, г. Хабаровск, Россия.
680035, Россия, г. Хабаровск, Тихоокеанская ул., 136.
2012002939@togudv.ru
ORCID: 0009-0007-7192-9166

КРАМАРЬ Елена Ивановна — ассистент Высшей школы физико-математических наук
Тихоокеанского государственного университета, г. Хабаровск, Россия.

680035, Россия, г. Хабаровск, ул. Тихоокеанская, 136.

000286@togudv.ru

ORCID: 0009-0000-2294-7113

THE AUTHORS

ZAYTSEV Alexander S.

Pacific National University

136 Tikhookeanskaya St., Khabarovsk, 680035, Russia

alzaytsev@togudv.ru

ORCID: 0009-0004-6895-6436

ZAYTSEV Sergey A.

Pacific National University

136 Tikhookeanskaya St., Khabarovsk, 680035, Russia

zaytsevs@togudv.ru

ORCID: 0000-0003-3771-3541

ZAYTSEVA Darya S.

Pacific National University

136 Tikhookeanskaya St., Khabarovsk, 680035, Russia

2012002939@togudv.ru

ORCID: 0009-0007-7192-9166

KRAMAR Elena I.

Pacific National University

136 Tikhookeanskaya St., Khabarovsk, 680035, Russia

000286@togudv.ru

ORCID: 0009-0000-2294-7113

*Статья поступила в редакцию 09.04.2025. Одобрена после рецензирования 27.05.2025.
Принята 27.05.2025.*

Received 09.04.2025. Approved after reviewing 27.05.2025. Accepted 27.05.2025.