

Получение амплитуды ионизации из решения временного уравнения Шрёдингера с помощью потока вероятности сквозь поверхность

В. В. Серов*, Т. А. Сергеева*, С. И. Виницкий†

** Кафедра теоретической физики
Саратовский Государственный университет
ул. Астраханская, д. 83, Саратов, Россия, 410012*

*† Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова
Объединённый институт ядерных исследований*

ул. Жолио-Кюри, д. 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980

Разработан новый метод для получения амплитуд ионизации атомов или молекул переменным внешним полем из решения временного уравнения Шрёдингера (ВУШ). Метод основан на совмещении двух ранее предложенных приближенных методов для вычисления амплитуды. Один из данных методов позволяет ограничиться вычислением волновой функции на малой пространственной области, а другой — для малого промежутка времени. Предлагаемый же в данной работе метод объединяет эти преимущества, так что он позволяет извлекать амплитуды ионизации, решая ВУШ на малой пространственной области для промежутка времени, не превышающего время действия внешнего ионизирующего поля. Показано, что при этом предлагаемый метод даёт более точные результаты по сравнению с каждым из его предшественников в отдельности и не страдает от присущих им недостатков. Справедливость данных утверждений продемонстрирована на примере одномерной задачи с модельным потенциалом. Обеспечение корректных граничных условий при этом достигалось с помощью внешнего комплексного скейлинга. В дальнейшем метод может быть применён для решения более сложных задач.

Ключевые слова: ионизация, лазерные импульсы, временное уравнение Шрёдингера, волновая функция, спектр испущенных электронов, численные методы.

1. Введение

В настоящий день бурно развивается область исследования сверхбыстрых процессов, инициируемых ультракоротким сверхмощными лазерными импульсами. Их теоретическое описание предполагает численное решение временного уравнения Шрёдингера (ВУШ) для системы нескольких частиц. Важной проблемой в этой области является извлечение из рассчитанной волновой функции информации об экспериментально наблюдаемых величинах, таких как энергетическое и угловое распределение выбитых электронов.

Для получения амплитуд ионизации из полученного численными методами решения ВУШ было предложено множество различных подходов. Среди них следует упомянуть метод временного Фурье-разложения волновой функции на границе [1]. Более продвинутой версией этого подхода является метод, базирующийся на вычислении зависящего от времени потока амплитуды вероятности через некоторую замкнутую поверхность [2–7] (следуя [5], мы будем называть этот метод *t-SURFF*). Другими авторами был предложен и успешно использовался метод, основанный на вычислении потока амплитуды вероятности от функции рассеяния, получаемой действием оператора функции Грина на волновую функцию после окончания лазерного импульса [8, 9] (ниже мы будем называть его *E-SURFF*). Радикальным решением проблемы является применение метода сопутствующих координат [10–14].

Однако все эти методы имеют различные недостатки. Например, в методе сопутствующих координат имеется проблема, связанная с некорректным моделированием связанных состояний [10, 11]. Применение метода *E-SURFF* [8, 9] требует использования огромной пространственной области, чтобы волновой пакет,

описывающий испущенный электрон, не успел дойти до её границ до завершения воздействия лазерного импульса. Метод t-SURFF [2–7] позволяет применять компактную пространственную сетку (при использовании различных методов подавления нефизического отражения волновой функции электрона от её границ), но требует выполнять решение ВУШ на большом промежутке времени, чтобы электрон успел улететь за пределы поверхности.

В настоящей работе мы предлагаем метод извлечения амплитуд, совмещающий достоинства методов E-SURFF [8] и t-SURFF [2]. Структура работа такова. В разделе 2 делается краткий обзор методов подавления нефизического отражения от границы, позволяющих получать решение ВУШ на небольшой пространственной области, в особенности метода внешнего комплексного скейлинга. В разделе 3 даётся теоретический вывод предлагаемого нами здесь метода получения амплитуд, который мы назвали t&E-SURFF, и устанавливается его связь с усовершенствованным методом t-SURFFc, предлагавшегося нами ранее [4]. В разделе 4 демонстрируются преимущества нового метода по сравнению с t-SURFF и E-SURFF на примере одномерной задачи. В заключении 5 делаются выводы, в частности, кратко обсуждается вопрос применения t-SURFFc и t&E-SURFF для вычисления амплитуд двойной ионизации.

2. Нефизическое отражение и методы его подавления

Движение частицы в лазерном поле (в дипольном приближении и в координатной калибровке) описывается с помощью ВУШ

$$i \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = [\hat{H}_0 - e\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{r}] \psi(\mathbf{r}, t). \quad (1)$$

Здесь

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \nabla^2 + U_0(\mathbf{r}) \quad (2)$$

— гамильтониан невозмущённой системы, $\mathbf{E}(t)$ — напряжённость внешнего электрического поля, e — заряд частицы.

Если потенциал системы $U_0(\mathbf{r})$ короткодействующий, то вдали от центра уравнение (1) переходит в ВУШ для свободного электрона во внешнем переменном однородном электрическом поле. Решение такого ВУШ известно — это функция Волкова, которая в координатной калибровке имеет вид

$$\Theta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = (2\pi)^{-3/2} \exp \left\{ i \left[\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - \frac{1}{2} \int_0^t p^2(\tau) d\tau \right] \right\}, \quad (3)$$

где \mathbf{k} — сохраняющийся канонический импульс, $\mathbf{p}(t) = \mathbf{k} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(t)$ — кинетический импульс, \mathbf{A} — векторный потенциал внешнего поля, который для электрического поля с напряжённостью $\mathbf{E}(t)$ может быть записан как

$$\mathbf{A}(t) = -c \int_0^t \mathbf{E}(\tau) d\tau.$$

Из полного набора функций Волкова можно получить функцию Грина в аналитическом виде [2, 5], что позволяет полностью описать эволюцию волновой функции вдали от центра. Таким образом, эволюция волновой функции нетривиальна только вблизи центра, и решать уравнение (1) на огромном объёме,

полностью вмещающем волновой пакет испущенных электронов, представляется непрактичным. Однако просто взять малый объем, поставив на его границе не меняющиеся со временем граничные условия (например условия Дирихле или Неймана), недостаточно: граница работает как зеркало, отражающее электроны обратно внутрь области, для которой решается ВУШ, приводя к полностью физически некорректным результатам (т.н. нефизическое отражение).

Математически последовательным методом решения этой проблемы является использование интегральных граничных условий [1, 2, 15]. Однако, во-первых, техническая реализация этих граничных условий в многомерном случае довольно сложна. А во-вторых, они требуют запоминания значений волновой функции на границе для всех значений времени и вычисления интеграла по времени на каждом временном шаге. В результате при расчёте на большом промежутке времени их реализация требует больших затрат компьютерной памяти, а время счета зависит от продолжительности моделируемого промежутка физического времени квадратично.

Другие подходы основаны на идее, что волновой пакет, описывающий испущенный электрон, должен быть поглощён или подавлен до того, как он дойдёт до границы сетки, так что на границе можно будет поставить граничные условия Дирихле. К таким методам относится внесение дополнительного мнимого поглощающего потенциала [16] и умножение на масочную функцию [17]. Но наиболее эффективным методом такого класса является внешний комплексный скейлинг (Exterior Complex Scaling, или ECS) [18, 19]. Он заключается в том, что контур интегрирования по радиальной координате r начиная с некоторого расстояния r_{CS} поворачивается в комплексную плоскость

$$r \rightarrow z = \begin{cases} r, & r \in [0, r_{CS}]; \\ r_{CS} + e^{i\vartheta_{CS}}(r - r_{CS}), & r > r_{CS}. \end{cases} \quad (4)$$

Здесь ϑ_{CS} — угол поворота контура. В результате функции, описывающие уходящие волны, приобретают экспоненциально падающие огибающие

$$|\exp(ipr)| = \exp[-p(r - r_{CS}) \sin \vartheta_{CS}].$$

Если выбрать достаточно большую ширину области скейлинга $l_{CS} = r_{\max} - r_{CS}$, огибающие на границе сетки становятся пренебрежимо малыми, и можно использовать граничные условия Дирихле. Однако поскольку комплексный скейлинг слабо подавляет волны, соответствующие электронам с малым импульсом p , такие волны могут достигать границы сетки, производные от их функций малы, и более точными являются граничные условия Неймана.

В одномерном случае необходимо использовать контур с двумя областями скейлинга с противоположными углами поворота в комплексную плоскость, как изображено на рис. 1.

Метод ECS достаточно эффективно используется для обеспечения корректных граничных условий уходящей волны в стационарных задачах рассеяния [19]. Но во временных задачах при использовании координатной калибровки внешнего поля с применением ECS имеется проблема. Медленные свободные электроны в переменном внешнем электрическом поле колеблются, периодически меняя направление кинетического импульса $\mathbf{p}(t)$. При «возвратном ходе» электрона убывающая экспонента в области скейлинга превращается в растущую, вместо нуля на границе получается огромное число, и вместо подавления отражения комплексный скейлинг его усиливает. Это можно назвать стимулированным нефизическим отражением. Но преодолевается эта проблема достаточно просто — достаточно взять ширину области скейлинга l_{CS} больше удвоенной максимальной амплитуды вынужденных колебаний электрона во внешнем переменном поле. Тогда стимулированная нефизическая отражённая волна не успевает дойти до области действительных координат $r < r_{CS}$ до того, как наступит следующая фаза цикла внешнего поля и $\mathbf{p}(t)$ сменит направление на исходное.

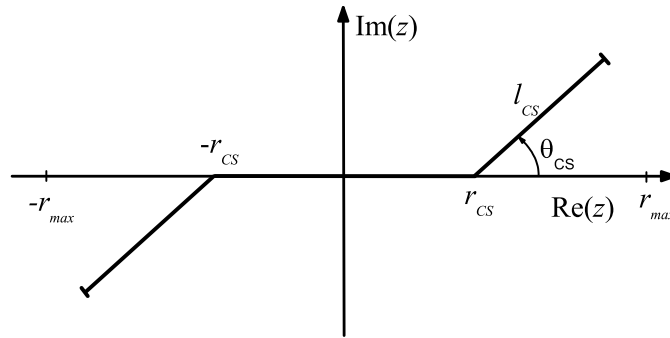


Рис. 1. Комплексный контур z , вводимый при внешнем комплексном скейлинге, для одномерного случая

3. Предлагаемый метод расчёта амплитуд

Если внешнее поле $\mathbf{E}(t) \neq 0$ только на промежутке времени $0 < t < T_{\text{pulse}}$, амплитуду вероятности вылета электрона с импульсом \mathbf{k} можно вычислить с помощью формулы

$$A(\mathbf{k}) = \int \Phi_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \Big|_{t > T_{\text{pulse}}} . \tag{5}$$

Здесь $\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \varphi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}) e^{-iEt}$, $E = k^2/2$, $\varphi_{\mathbf{k}}^{(-)}$ — собственная функция континуума невозмущённого гамильтониана $\hat{H}_0 \varphi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}) = E \varphi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r})$.

Из амплитуды можно получить плотность вероятности ионизации с испусканием электрона с импульсом \mathbf{k}

$$\rho(\mathbf{k}) = \frac{dP}{d\mathbf{k}}(\mathbf{k}) = |A(\mathbf{k})|^2. \tag{6}$$

Вычисления с помощью подобных формул возможны только при условии, что известны стационарные волновые функции $\varphi_n(\mathbf{r})$ и $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, а если используются какие-либо методы устранения нефизического отражения, то формула для амплитуды вылета становится просто неприменимой из-за того, что решение ВУШ известно только в ограниченной области, много меньшей объёма, в которой эта функция не равна нулю.

В [2] предложен способ вычисления амплитуды вероятности ионизации, не требующий знания точной функции континуума. Он основан на Фурье-разложении зависящего от времени потока амплитуды вероятности сквозь некоторую замкнутую поверхность

$$A(\mathbf{k}) = \int_{-\infty}^{\infty} \oint_S \mathbf{j} \left[\psi(\mathbf{r}, t), \chi_{\mathbf{k}}^{(-)*}(\mathbf{r}, t) \right] \cdot \mathbf{n}_S dS dt. \tag{7}$$

Здесь S — какая-либо замкнутая поверхность, окружающая систему и настолько удалённая от центра, что на ней можно пренебречь потенциалом системы (обычно

сфера), \mathbf{n}_S — её нормальный вектор, $\chi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}, t)$ — функция, являющаяся приближенным решением ВУШ для области вне S и описывающая электрон с каноническим импульсом \mathbf{k} . Вектор потока амплитуды вероятности

$$\mathbf{j}[\psi, \varphi] = \frac{i}{2}[\psi \hat{\mathbf{D}}^* \varphi - \varphi \hat{\mathbf{D}} \psi], \quad (8)$$

где в координатной калибровке оператор $\hat{\mathbf{D}} = \nabla$. Пробная функция $\chi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}, t)$ должна удовлетворять ВУШ при $r > r_S$. В случае если потенциал системы короткодействующий и пренебрежимо мал при $r > r_S$, в качестве $\chi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}, t)$ необходимо использовать решение ВУШ для свободной частицы в переменном внешнем электрическом поле, т.е. функцию Волкова (3), $\chi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}, t) = \Theta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$.

Используя численный расчёт, мы можем получить решение уравнения (1) только на конечном промежутке времени $t \in [0, T]$. Для извлечения амплитуды ионизации можно применить формулу, аналогичную (7), но с интегрированием по этому конечному промежутку времени

$$A_T(\mathbf{k}) = \int_0^T \oint_S \mathbf{j}[\psi(\mathbf{r}, t), \chi_{\mathbf{k}}^{(-)*}(\mathbf{r}, t)] \cdot \mathbf{n}_S dS dt. \quad (9)$$

Следуя [5], в дальнейшем мы будем называть такой подход t-SURFF (time-dependent surface flux, метод на основе зависящего от времени потока через поверхность). Если система первоначально находится в связанном состоянии, всегда можно выбрать величину r_S достаточно большой, чтобы выполнялось условие $\psi(\mathbf{r}_S, t \leq 0) = 0$. Поэтому замена нижнего предела интегрирования $t = -\infty$ в уравнении (7) на $t = 0$ в уравнении (9) не вызывает существенных проблем. Для того, чтобы было допустимо использование конечного верхнего предела $t = T$ в формуле (9), по меньшей мере нужно, чтобы после окончания импульса электрон успел вылететь за пределы сферы S , т.е. должно выполняться условие $T \gg T_{\text{pulse}} + r_S/k$, r_S — радиус сферы S . Если значение волновой функции на поверхности S при достаточно большом времени $\psi(\mathbf{r}_S, t > T) = 0$, то $A(\mathbf{k}) = A_T(\mathbf{k})$. Но если велика вероятность вылета электронов очень малой энергии, то $\psi(\mathbf{r}_S, t)$ стремится к нулю очень медленно. При ненулевой же $\psi(\mathbf{r}_S, T)$ формула (9) даёт результаты, осциллирующие с увеличением T (см. кривые t-SURFF на рис. 2). В работе [3] для борьбы с этими осцилляциями применялось усреднение $A_T(\mathbf{k})$ по T .

Но мы можем воспользоваться тем фактом, что после окончания лазерного импульса волновая функция может быть выражена через пропагатор невозмущённой системы

$$\psi(\mathbf{r}, t > T) = \exp[-i(t - T)\hat{H}_0]\psi(\mathbf{r}, T), \quad (10)$$

а в функции Волкова после исчезновения внешнего поля эволюционирует только фазовый множитель

$$\chi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}, t > T) = \exp[-iE(t - T)]\chi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r}, T), \quad (11)$$

где $E = k^2/2$. Разобьём интеграл по времени в (7) на два интеграла — от 0 до T и от T до ∞

$$A(\mathbf{k}) = A_T(\mathbf{k}) + A_B(\mathbf{k}). \quad (12)$$

Здесь

$$A_B(\mathbf{k}) = \int_T^\infty \oint_S \mathbf{j}[\psi(\mathbf{r}, t), \chi_{\mathbf{k}}^{(-)*}(\mathbf{r}, t)] \cdot \mathbf{n}_S dS dt \quad (13)$$

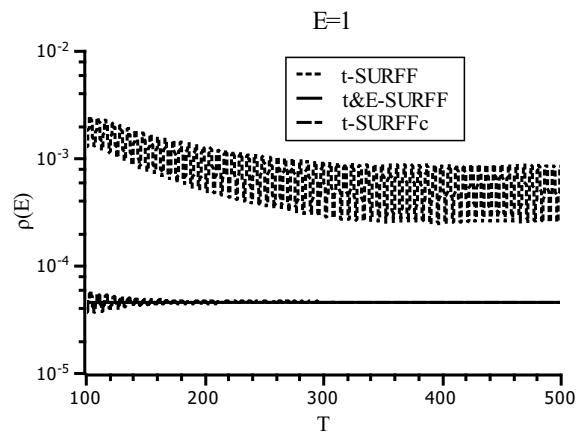
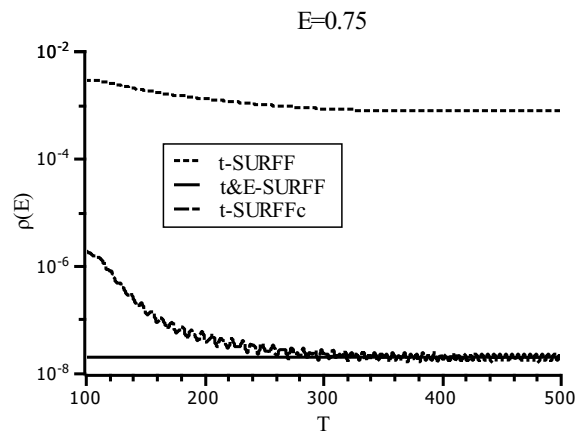
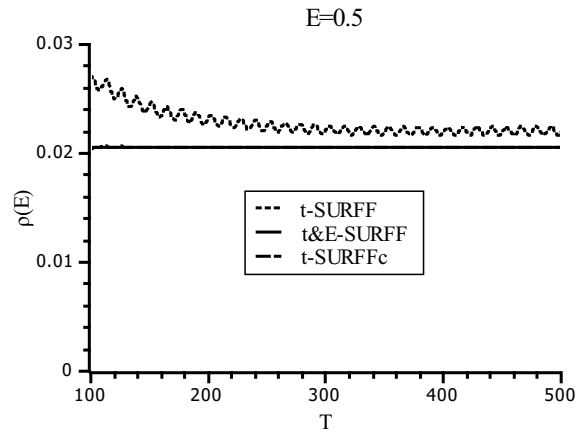


Рис. 2. Плотность вероятности испускания электрона $\rho(E)$ для фиксированной энергии испущенного электрона E как функция времени интегрирования T , полученная различными методами: t&E-SURFF (непрерывная кривая), t-SURFFc (штриховая кривая), t-SURFF (пунктирная кривая)

есть вклад в (7) от потока амплитуды вероятности, который пройдёт сквозь поверхность S после T . Используя (10) и (11), мы, следуя [8], можем формально взять интеграл по времени и получим

$$A_B(\mathbf{k}) = \oint_S \mathbf{j} \left[\psi_{\text{sc}}(\mathbf{r}; T), \chi_{\mathbf{k}}^{(-)*} \right] \cdot \mathbf{n}_S dS, \quad (14)$$

где функция $\psi_{\text{sc}}(\mathbf{r}; T)$ определяется выражением

$$\psi_{\text{sc}}(\mathbf{r}; T) \equiv -\frac{1}{i(E - \hat{H}_0 + i0)} \psi(\mathbf{r}, T). \quad (15)$$

Для вычисления $\psi_{\text{sc}}(\mathbf{r}; T)$ нужно решить приведённое стационарное уравнение Шрёдингера

$$(E - \hat{H}_0) \psi_{\text{sc}}(\mathbf{r}; T) = i\psi(\mathbf{r}, T) \quad (16)$$

с граничным условием уходящей волны. Уравнения (14,16) были выведены в [8]. Метод, предложенный в [8], основан на том, что при достаточно большом r_S потоком вероятности при $t < T = T_{\text{pulse}}$ можно пренебречь и $A = A_B$. Ниже мы будем называть подход [8] E-SURFF (energy-dependent surface flux, т.е. метод зависящего от энергии потока через поверхность). Предлагаемый нами здесь метод, основанный на формуле (12), т.е. суммировании результатов методов t-SURFF and E-SURFF, ниже мы будем называть t&E-SURFF.

В работе [4] мы предложили приближенный метод вычисления поправки к (9), основанный на предположении, что

$$\psi(\mathbf{r}_S, t > T) \simeq \psi(\mathbf{r}_S, T) \exp[-iE_{\text{eff}}(t - T)], \quad (17)$$

где E_{eff} — комплексная «эффективная энергия», вычислявшаяся по формуле

$$E_{\text{eff}}(\mathbf{r}_S, T) = \frac{i}{\psi(\mathbf{r}_S, T)} \frac{\partial \psi(\mathbf{r}_S, T)}{\partial t}. \quad (18)$$

Этот предположение исходит из идеи, что при большом t волновая функция на границе $\psi(\mathbf{r}_S, t)$ стремится к суперпозиции состояний с близкими энергиями (приблизительно равными действительной части E_{eff}) и постепенно уменьшается со временем из-за продолжающегося ухода частиц. Убывание $\psi(\mathbf{r}_S, t)$ описывается мнимой частью E_{eff} , так что должно быть $\Im E_{\text{eff}} < 0$. Тогда (13) переходит в

$$\tilde{A}_B(\mathbf{k}) = -\oint_S \frac{1}{i(E - E_{\text{eff}})} \mathbf{j} \left[\psi(\mathbf{r}, T), \chi_{\mathbf{k}}^{(-)*}(\mathbf{r}, T) \right] \cdot \mathbf{n}_S dS. \quad (19)$$

Результирующая формула

$$A(\mathbf{k}) = A_T(\mathbf{k}) + \tilde{A}_B(\mathbf{k}). \quad (20)$$

Хотя этот подход требует времени решения $T > T_{\text{pulse}} + r_S/k$, чтобы интересующий нас электрон со скоростью k после окончания внешнего воздействия успел вылететь изнутри S , его преимуществами является относительная простота использования выражений (18,19) и существенное сокращение необходимого T по сравнению с использованием оригинального t-SURFF, даваемого выражением (9). Дальше мы будем называть метод, основанный на формуле (20), t-SURFFc (corrected t-SURFF, или уточнённый t-SURFF).

Если потенциал системы не короткодействующий, а кулоновский, то функция Волкова является слишком грубым приближением для использования в качестве пробной функции $\chi_k^{(-)}$ даже на большом расстоянии r_S от центра системы. Для этого случая в [15] успешно использовались пробные функции, являющиеся произведением функции Волкова и кулоновского фазового множителя.

4. Результаты на примере модельной системы

В качестве модельной системы использовалась одномерная система [1, 2]

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U_0(x) - \mathcal{E}(t)x \right] \psi(x, t) \quad (21)$$

с переменным внешнем полем $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \sin^2(\pi t/T_{\text{pulse}}) \sin \omega t$ и потенциалом Пешля–Теллера $U_0(x) = -\frac{1}{\cosh^2 x}$. В качестве начального состояния использовалось единственное связанное состояние в этом потенциале $\psi(x, 0) = \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2} \cosh x}$, имеющее энергию $E_0 = -0,5$. Во всех рассмотренных примерах частота $\omega = 0,5$ (что совпадает с потенциалом ионизации системы $I = |E_0| = 0,5$), амплитуда напряжённости $\mathcal{E}_0 = 0,05$, а продолжительность лазерного импульса $T_{\text{pulse}} = 8T_{\text{osc}}$, $T_{\text{osc}} = 2\pi/\omega$. Настройка частоты внешнего поля на переход из основного состояния в состояние с нулевой энергией обеспечивает значительное количество электронов с очень малой энергией, чрезвычайно медленно покидающих пространственную область, в которой решается ВУШ. Это служит суровым тестом для сравниваемых методов.

В качестве пробных функций использовались одномерные функции Волкова

$$\chi_k(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ i \left[px - \frac{1}{2} \int_0^t p^2(\tau) d\tau \right] \right\}. \quad (22)$$

Для численного решения уравнения (21) применялась простейшая численная схема на основе конечно-разностной формулы 2-го порядка для аппроксимации второй производной по x , а также схемы Кранка–Николсона для временной эволюции. Уравнение (16), численное решение которого требуется для реализации E-SURFF и t&E-SURFF, решалось с помощью метода прогонки (LU-decomposition) для трёхдиагональной матрицы. Шаги пространственной сетки $h = 0,01$ и $dt = 0,01$ были выбраны достаточно малыми для того, чтобы погрешности пространственной и временной аппроксимации были малы по сравнению с другими источниками погрешностей.

Для одномерной задачи замкнутая поверхность S с радиусом r_S редуцируется до двух точек $x_S = \pm r_S$ на прямой x . Мы использовали для вычисления амплитуды вероятности вылета электрона влево (т.е. для $k < 0$) поток через левую точку $x_S = -r_S$, а для вычисления амплитуды вылета вправо ($k > 0$) – поток через правую точку $x_S = r_S$. Формально интегрирование по поверхности в (7) в одномерном случае должно бы было быть замещено на суммирование по двум точкам. Однако легко показать, что вклад потока амплитуды вероятности через границу, противоположную направлению испускания электрона, в результат (7) равен нулю. Но для интегралов по времени с конечными пределами, фигурирующих в (9) и (14), этот член вносит дополнительные осцилляции в зависимости от энергии в результатах этих методов. При суммировании этих результатов, т.е. в t&E-SURFF, осциллирующий член исчезает, и результат не отличается от того, который получается с использованием потока только через одну точку. То есть учёт потока сквозь обе точки приводит только к замедлению сходимости t-SURFF и E-SURFF. Поэтому, а также поскольку проблема с «контрпотокным» членом

возникает только в одномерном случае, мы всюду использовали вычисления с одной точкой.

Комплексный контур имеет вид, изображённый на рис. 1. Точки поворота в комплексную плоскость $x_{CS} = \pm r_{CS}$ для всех расчётов были выбраны вблизи точки извлечения амплитуд $r_{CS} = r_S + h/2$. Длина отрезка контура в области комплексного скейлинга была выбрана равной $l_{CS} = 10$, а угол скейлинга $\vartheta_{CS} = 45^\circ$, что обеспечивает $\max |\Im x| = 10/\sqrt{2}$.

На рис. 3 демонстрируется плотность вероятности $\rho(E)$ испускания электрона с энергией E

$$\rho(E) = \frac{dP}{dE} = \frac{1}{k} [|A(-k)|^2 + |A(k)|^2],$$

рассчитанная методами t&E-SURFF, t-SURFFc, t-SURFF и E-SURFF для одной и той же точки экстракции $x_S = 10$ (и, соответственно, одинаковой пространственной сетки) и одинаковом времени $T = T_{\text{pulse}}$.

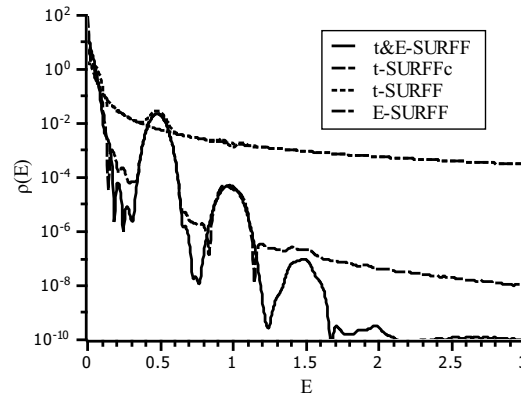


Рис. 3. Функция $\rho(E)$, полученная из одной и той же волновой функции $\psi(x, t)$ различными методами: t&E-SURFF (непрерывная кривая), t-SURFFc (штриховая кривая), t-SURFF (пунктирная кривая) и E-SURFF (штрихпунктирная кривая). Параметры $x_S = 10$, $T = 8T_{\text{osc}}$

На рис. 2 демонстрируется сходимость $\rho(E)$ с увеличением T , причём $T > T_{\text{pulse}}$. Энергии, для которых показана $\rho(E)$ на рис. 2(а) и 2(б) соответствуют максимумам кривой t&E-SURFF на рис. 3, а рис. 2(б) — минимуму. Видно, что результат t&E-SURFF совершенно не зависит от T , t-SURFFc достаточно быстро сходится к значению t&E-SURFF, а вот оригинальный t-SURFF сходится чрезвычайно медленно и сильно осциллирует. Это связано с тем, что при выбранных параметрах внешнего поля появляется большое количество электронов малой энергии и волновая функция в точках экстракции амплитуд убывает чрезвычайно медленно. Осцилляции появляются из-за того, что истинные амплитуды ионизации в t-SURFF складываются с паразитным членом, возникающим из-за неравенства нулю $\psi(x_S, t)$ при $t \geq T$. Заметим, что на рис. 2(б) в кривой t-SURFF осцилляций нет, так как при энергии $E = 0.75$ функция $\rho(E)$ имеет глубокий минимум, и истинная амплитуда пренебрежимо мала по сравнению с паразитным членом, так что кривая t-SURFF содержит только паразитный член, постепенно убывающий со временем из-за убывания $\psi(x_S, t)$.

На рис. 4 демонстрируется сходимость результатов E-SURFF с увеличением расстояния до точек экстракции r_S . Видно, что спектр, полученный с помощью E-SURFF, с увеличением r_S сходится к спектру, полученному с использованием t&E-SURFF при $r_S = 10$, причём сначала сходимость достигается при малых энергиях. Причина этого очевидна: E-SURFF предполагает извлечение амплитуд из волнового пакета внутри области, ограниченной r_S , а основной вклад в волновой пакет на малом расстоянии от центра вносят электроны малых энергий.

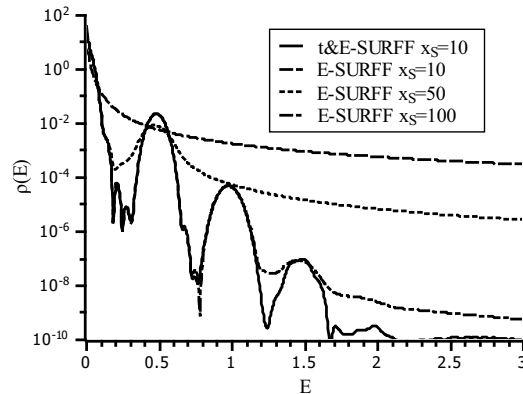


Рис. 4. Функция $\rho(E)$ для $T = T_{\text{pulse}}$, полученная методами t&E-SURFF для $r_S = 10$ (непрерывная кривая), а также E-SURFF для $r_S = 10$ (штриховая кривая), $r_S = 50$ (пунктирная кривая) и $r_S = 100$ (штрихпунктирная кривая)

Таким образом, t&E-SURFF является наиболее эффективным методом из всех рассмотренных, позволяя получить амплитуды вероятности при решении ВУШ на малой пространственной области и малом времени интегрирования. t-SURFFc, хотя и не обеспечивает столь быстрой сходимости по времени, гораздо эффективней чистого t-SURFF, и не требует решения уравнения (16), в отличие от t&E-SURFF.

5. Заключение

В настоящей работе мы предлагаем метод получения амплитуд из рассчитанной волновой функции без необходимости знания точного вида функции континуума, названный нами t&E-SURFF и состоящий в суммировании результатов методов t-SURFF [2, 5] и E-SURFF [8]. В методе t-SURFF фактически вычисляется амплитуда вероятности того, что частица с импульсом \mathbf{k} покинет объем, окруженный поверхностью S , до $t = T$. Этот метод позволяет получать амплитуды при решении ВУШ на небольшой пространственной области, но требует решения ВУШ на длительном промежутке времени после окончания внешнего воздействия на систему, чтобы частицы успели долететь до поверхности S , а волновая функция на этой поверхности успела обратиться в нуль. E-SURFF же даёт амплитуду вероятности того, что частица с импульсом \mathbf{k} покинет объем, окруженный поверхностью S , после момента времени T . Этот метод позволяет вычислить амплитуды, решив ВУШ только для промежутка времени, на котором внешнее поле не равно нулю, но требует решать ВУШ на огромной пространственной области, чтобы волновой пакет после окончания внешнего воздействия полностью умещался внутри S . Метод t&E-SURFF позволяет совместить преимущества обоих методов, поскольку для его реализации достаточно решить ВУШ на небольшом пространственном объеме для (относительно короткого) промежутка времени $T = T_{\text{pulse}}$, когда на систему воздействует внешнее поле.

Ранее предложенный нами метод t-SURFFc [4] проще t&E-SURFF в реализации и обычно требует меньшего T , чем оригинальный t-SURFF, хотя для него тоже необходимо $T \gg T_{\text{pulse}}$. Однако t-SURFFc в его простейшем виде можно применять только для одночастичных задач. Для двухчастичных задач вроде двойной ионизации гелия [11] волновая функция на границе представляет из себя суперпозицию состояний, описывающих как двойную ионизацию, так и однократную ионизацию с оставшимся связанным электроном во множестве возбужденных состояний остаточного иона. Все эти состояния имеют существенно различающиеся энергии, из-за чего $|\psi(\mathbf{r}_S, t)|$ даже при очень больших t не стремится монотонно к нулю, а сложным образом осциллирует, приближение (17) не выполняется, а $\mathfrak{Z}_{\text{eff}}$, если вычислять эффективную энергию по формуле (18), периодически

приобретает положительные значения. В частности, именно из-за этого мы, после попыток применить t-SURFFc, в работе [11] использовали для извлечения амплитуд двойной ионизации метод сопутствующих координат.

Поскольку в t-SURFF и E-SURFF используется одинаковая формула для потока амплитуды вероятности сквозь поверхность, логарифмическая фазовая добавка, возникающая из-за межэлектронного взаимодействия [20], одинакова для t-SURFF и E-SURFF, что позволяет без проблем суммировать их результат и таким образом реализовать t&E-SURFF для вычисления двойной ионизации. Для расчёта однократной ионизации двухэлектронной системы с помощью t-SURFF в [6] предложены эффективные пробные функции, получаемые методом обратной эволюции связанных состояний иона во времени. Совмещение предложенного там метода с E-SURFF также тривиально. Но проверка реализуемости такого подхода для описания одно- и многократной ионизации многочастичных систем заслуживает отдельной работы.

Литература

1. Boucke K., Schmitz H., Kull H.-J. Radiation Conditions for the Time-Dependent Schrödinger Equation: Application to Strong-Field Photoionization // *Physical Review A*. — 1997. — Vol. 56, No 1. — Pp. 763–771.
2. Integral Boundary Conditions for the Time-Dependent Schrödinger Equation: Atom in a Laser Field / A. M. Ermolaev, I. V. Puzynin, A. V. Selin, S. I. Vinitzky // *Physical Review A*. — 1999. — Vol. 60, No 6. — Pp. 4831–4845.
3. Wave-Packet Evolution Approach to Ionization of the Hydrogen Molecular Ion by Fast Electrons / V. V. Serov, V. L. Derbov, B. B. Joulakian, S. I. Vinitzky // *Physical Review A*. — 2001. — Vol. 63, No 6. — Pp. 062711–1–062711–8.
4. Serov V. V. Calculation of Intermediate-Energy Electron-Impact Ionization of Molecular Hydrogen and Nitrogen using the Paraxial Approximation // *Physical Review A*. — 2011. — Vol. 84, No 6. — Pp. 062701–1–062701–8.
5. Tao L., Scrinzi A. Photo-Electron Momentum Spectra from Minimal Volumes: the Time-Dependent Surface Flux Method // *New Journal of Physics*. — 2012. — Vol. 84. — Pp. 013021–1–013021–16.
6. Scrinzi A. t-SURFF: Fully Differential Two-Electron Photo-Emission Spectra // *New Journal of Physics*. — 1969. — Vol. 14. — Pp. 085008–1–085008–17.
7. Modern Methods for Calculations of Photoionization and Electron Impact Ionization of Two-Electron Atoms and Molecules / V. V. Serov, V. L. Derbov, T. A. Sergeeva, S. I. Vinitzky // *Physics of Particles and Nuclei*. — 2013. — Vol. 44, No 4. — Pp. 757–790.
8. 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. — Pp. 043420–1–043420–10.
9. Time-Dependent Formalism of Double Ionization of Multielectron Atomic Targets / F. L. Yip, A. Palacios, T. N. Rescigno et al. // *Chemical Physics*. — 2013. — Vol. 414. — Pp. 112–120.
10. Adaptive Numerical Methods for Time-Dependent Schrödinger Equation in Atomic and Laser Physics / V. L. Derbov, M. S. Kaschiev, V. V. Serov et al. — Vol. 5067. — 2003. — Pp. 218–227.
11. Wave-Packet-Evolution Approach for Single and Double Ionization of Two-Electron Systems by Fast Electrons / V. V. Serov, V. L. Derbov, B. B. Joulakian, S. I. Vinitzky // *Physical Review A*. — 2007. — Vol. 75, No 1. — Pp. 012715–1–012715–9.
12. Charge-Scaling Law for Angular Correlation in Double Photoionization of Ions and Atoms with Two Active Electrons / V. V. Serov, V. L. Derbov, B. B. Joulakian, S. I. Vinitzky // *Physical Review A*. — 2008. — Vol. 78, No 6. — Pp. 063403–1–063403–9.

13. *Serov V. V., Sergeeva T. A.* Validity of the Wannier Threshold Law for Angular Correlation Width in Double Photoionization of Atoms // *Physical Review A*. — 2010. — Vol. 82, No 6. — Pp. 063413–1–063413–7.
14. Time Scaling with Efficient Time-Propagation Techniques for Atoms and Molecules in Pulsed Radiation Fields / A. Hamido, J. Eiglsperger, J. Madroño et al. // *Physical Review A*. — 2011. — Vol. 84, No 1. — Pp. 013422–1–013422–14.
15. *Ermolaev A. M., Selin A. V.* Integral Boundary Conditions for the Time-Dependent Schrödinger Equation: Superposition of the Laser Field and a Long-Range Atomic Potential // *Physical Review A*. — 2000. — Vol. 62, No 1. — Pp. 015401–1–015401–4.
16. Continuum Remover-Complex Absorbing Potential: Efficient Removal of the Non-physical Stabilization Points / Y. Sajejev, V. Vysotskiy, L. S. Cederbaum, N. Moiseyev // *The Journal of Chemical Physics*. — 2009. — Vol. 131, No 21. — Pp. 211102–1–211102–4.
17. *Krause J. L., Schafer K. J., Kulander K. C.* Calculation of Photoemission from Atoms Subject to Intense Laser Fields // *Physical Review A*. — 1992. — Vol. 45, No 7. — Pp. 4998–5010.
18. *McCurdy C. W., Stroud C. K.* Eliminating Wavepacket Reflection from Grid Boundaries using Complex Coordinate Contours // *Physical Review A*. — 1991. — Vol. 63, No 1–3. — Pp. 323–330.
19. *McCurdy C. W., Baertschy M., Rescigno T. N.* Solving the Three-Body Coulomb Breakup Problem using Exterior Complex Scaling // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2004. — Vol. 37, No 17. — Pp. R137—R187.
20. *Rescigno T. N., Baertschy M., McCurdy C. W.* Resolution of Phase Ambiguities in Electron-Impact Ionization Amplitudes // *Physical Review A*. — 2003. — Vol. 68, No 2. — Pp. 020701(R)–1–020701(R)–4.

UDC 539.182, 535.33

Ionization Amplitude Extraction from the Solution of the Time-Dependent Schrödinger Equation by Means of the Probability Amplitude Surface Flux

V. V. Serov*, T. A. Sergeeva*, S. I. Vinitzky†

* *Department of Theoretical Physics
Saratov State University*

83, Astrahanskaja str., Saratov, Russia, 410012

† *Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics
Joint Institute for Nuclear Research*

6, Joliot-Curie str., Dubna, Moscow region, Russia, 141980

We have developed a new method for the obtaining of the amplitudes of ionization of atoms and molecules by the strong time-dependent field from the solution of the time-dependent Schrödinger equation (TDSE). The method is based upon the conjunction of the two approximate approaches for the amplitude computation that have been proposed earlier. One of these approaches makes it possible to confine oneself to evaluate the wavefunction on the small space region while the other allows to do it for the small time interval. The method that is being suggested here combines these advantages, so it enables to extract ionization amplitudes by means of solving the TDSE both on the small space region and for the time interval not exceeding the external ionizing field duration. It is shown that the method we are proposing yields results more exact compared to the precursors as well as does not suffers from their peculiar drawbacks. These statements validity has been demonstrated by the example of the one-dimensional problem with the model potential. The correct boundary conditions were provided by means of the exterior complex scaling. In the future the method might be utilized for the aid of the solution of much more complicated problems.

Key words and phrases: ionization, laser pulses, time-dependent Schrödinger equation, wave function, emitted electrons spectrum, numerical methods.