

Форма 503. РАЗВЕРНУТЫЙ НАУЧНЫЙ ОТЧЕТ

- 3.1. Номер проекта
11-01-00523
- 3.2. Название проекта
Математическое моделирование воздействия быстрых частиц, лазерных импульсов и магнитных полей на атомы, молекулы и полупроводниковые наноструктуры
- 3.3. Коды классификатора, соответствующие содержанию фактически проделанной работы
01-222 02-720 02-320
- 3.4. Объявленные ранее (в исходной заявке) цели проекта на 2013 год
Настоящий отчет является итоговым, поэтому приведенные в нем сведения относятся ко всему отчетному периоду с 2011 по 2013 гг. и включают сведения годовых отчетов за 2011 и 2012 гг.

Заявленная общая цель проекта - выяснение новых фундаментальных свойств атомов, молекул и квантоворазмерных наноструктур путем численного моделирования их строения и динамики их взаимодействия с быстрыми частицами и электромагнитным излучением на основе строгой теории и эффективных численных и численно-символьных алгоритмов с целью интерпретации новейших экспериментальных данных и прогнозирования новых экспериментов.

В рамках указанной фундаментальной проблемы на основе корректных математических моделей и оригинальных численных подходов было запланировано решение трех групп конкретных фундаментальных задач. 1) Моделирование ионизации атомов и простых молекул под действием налетающих частиц и электромагнитных полей с учетом многочастичных корреляций. 2) Моделирование динамики и оптических переходов для электронных, примесных и экситонных состояний в полупроводниковых квантоворазмерных наноструктурах. 3) Моделирование канализирования ионов в многослойных кристаллических гетероструктурах.

В процессе выполнения заявленной программы возникла необходимость дополнительных исследований. Так, при моделировании ионизации атомов и молекул аттосекундными лазерными импульсами потребовалось выяснение природы временной задержки детектирования продуктов ионизации, а задача канализирования частиц в кристаллах была существенно дополнена рассмотрением туннелирования композитных квантовых систем через потенциальные барьеры.

В частности, календарный план 2013 года включал решение следующих задач:

- Исследование возможностей метода электронной импульсной спектроскопии атомов и молекул в присутствии электромагнитного поля для получения дополнительных сведений о квантовой структуре атомных и молекулярных систем посредством численного моделирования. Разработка простых алгоритмов вычисления матричных элементов.
- Разработка последовательной теории ($e,2e$) процесса на поверхности твердого тела с целью интерпретации результатов последних экспериментов на различных металлах
- Численный расчет времени задержки вылета электронов при фотоионизации молекулы водорода в зависимости от ориентации молекулы и теоретическое изучение возможности выделения такой информации с помощью современных экспериментальных методов изучения аттосекундных процессов.
- Численный расчет зависимости дифференциального сечения диссоциативной ионизации-возбуждения молекулы водорода ударом электрона промежуточных энергий от ориентации молекулы для интерпретации новых экспериментальных данных по ионизации ориентированных молекул.
- Разработка нового метода, численного алгоритма и проблемно-ориентированного комплекса программ для решения краевых задач, описывающих экситонные состояния моделей полупроводниковых наноструктур в приближении эффективной массы и верификация моделей при сравнении с экспериментальными данными.

3.5. Степень выполнения поставленных в проекте задач

Поставленные в проекте задачи выполнены. По большинству пунктов плана получены и опубликованы завершенные результаты. Решен ряд дополнительных задач, непосредственно связанных с глобальной целью проекта. Обобщая выполнение календарных планов 2011-2013 гг., отметим следующее.

- Существенно модифицированы некоторые FORTRAN-программы, написанные на основе так называемого метода адаптивного подразбиения (adaptive subdivision method). В частности, теперь они позволяют обрабатывать больший объем информации в оперативной памяти, использовать комплексные числа и проводить параллельные вычисления. Эти модифицированные программы использовались в расчетах некоторых матричных элементов процессов однократной перезарядки протона на атоме гелия, и прямой ионизации атома быстрым электроном.
- Сформулирована полуаналитическая модель взаимодействия лазерного импульса с атомом (молекулой), основанная на представлении кулоновского потенциала суммой сепарабельных нелокальных потенциалов (идея позаимствовано из ядерной физики). Эта модель приводит к альтернативным и значительно более простым численным методам решения задач однократной ионизации атома (молекулы) в переменном электрическом поле, чем разложение волновой функции по некоторому базису.
- Исследована сходимость и устойчивость метода J-матрицы в применении к интегральному уравнению Липпмана - Швингера (ЛШ) для волновой функции двухэлектронного континуума, которая используется в широком круге задач двукратной ионизации атома. Определены границы применимости этого метода, где он работает устойчиво. При этом отмечается гораздо лучшее согласие с экспериментом при минимуме подгоночных параметров, чем у метода псевдосостояний (т.н. CCC метод).
- Исследованы возможности электронной спектроскопии атомов в присутствии сильного внешнего электромагнитного поля для получения дополнительной информации об их квантовой структуре. Сформулированы условия, накладываемые на параметры лазерного поля и кинематику процесса, при которых изучение влияния лазера на квантовую систему методом электронной импульсной спектроскопии становится наиболее эффективным.
- Развит общий формализм и разработан математический аппарат для численного моделирования ($e,2e$) процессов на поверхностях твердых тел с целью описания результатов последних экспериментов. На этой базе начато создание соответствующего комплекса FORTRAN-программ.
- Расчет абсолютных значений многократного дифференциального сечения однократной ионизации-диссоциации и двойной ионизации ориентированной молекулы водорода ударом электрона промежуточных энергий осуществлен в параксиальном приближении без использования первого борновского приближения, причем использован временной метод Хартри-Фока и рассчитаны сечения не только для молекулярного водорода, но и для молекулы азота, то есть намеченный план перевыполнен. Выполнен расчет двукратной ионизации молекулярного водорода ударом быстрого электрона и лазерным излучением. Численно рассчитана зависимость дифференциального сечения диссоциативной ионизации-возбуждения молекулы водорода ударом электрона промежуточных энергий от ориентации молекулы для интерпретации новых экспериментальных данных по ионизации ориентированных молекул.
- Примесные состояния моделей полупроводниковых наноструктур (квантовых точек) рассчитаны в приближении эффективной массы с использованием усовершенствованного проблемно-ориентированного комплекса программ для решения краевых задач, сочетающего аналитические и численные алгоритмы. Полученные результаты использованы

для верификации моделей при сравнении с экспериментальными данными.

- На основе математического моделирования исследована возможность ускорения легких частиц, каналируемых в периодически искривленном кристалле, с помощью лазерного излучения.
- Численно рассчитано время задержки вылета электронов при фотоионизации молекулы водорода в зависимости от ориентации молекулы и теоретически изучена возможность выделения такой информации с помощью современных экспериментальных методов изучения аттосекундных процессов
- Сверх намеченного предложен метод извлечения амплитуды ионизации из решения временного уравнения Шредингера (ВУШ) для системы в переменном внешнем поле, представляющий собой гибрид двух разработанных ранее методов и сочетающий в себе их преимущества. Он позволяет извлекать амплитуды ионизации, решая ВУШ на небольшой пространственной области и для промежутка времени, не превышающего продолжительность действия внешнего поля.

3.6. Полученные за отчетный период важнейшие результаты

Разработан ряд компьютерных программ многомерного интегрирования, в том числе с быстроосциллирующими функциями. В отличие от стандартных программ последовательного интегрирования, наши работают быстрее, имеют контроль точности и дают корректные по абсолютной величине и форме результаты для дифференциальных сечений процессов рассеяния, в частности, при расчете реакции захвата электрона протоном из атома гелия, когда ион гелия остается в возбужденном состоянии (см. дискуссию *Journal of Physics B: At. Mol. Opt. Phys.* 46 (2013) 028001, 028002). При написании программы использовался метод записи подынтегрального выражения в гиперсферическом базисе. Такой подход позволяет в подавляющем большинстве случаев взять интеграл по гиперрадиусу аналитически, и свести оставшийся восьмимерный интеграл к угловому интегрированию на гиперсфере единичного радиуса. Эти интегралы уже не содержат опасных сингулярностей и осцилляций. В 2012 году вышла в свет коллективная работа (*Phys. Rev. A.* 85 (2012), 022707), в которой произведен расчет реакции перезарядки (charge transfer) протона на атоме гелия, когда ион гелия и атом водорода остаются в основном состоянии (экспериментаторы способны выделять этот канал реакции на фоне других). Расчеты производились в первом и втором борновских приближениях с привлечением программ шестимерного интегрирования, которые показали хорошую численную устойчивость и сходимость к эксперименту. Здесь, с учетом структуры подынтегральных выражений матричных элементов, применялось преобразование Лапласа, позволившее в ряде случаев понизить кратность интегралов. Помимо этого, проведены расчеты в первом борновском приближении реакции перезарядки с ионизацией (transfer ionization) $H + He = H + e + He^{++}$. В уникальных экспериментах было измерено распределение испущенных электронов по компонентам их импульсов. Для расчетов пришлось привлекать суперкомпьютеры МГУ с распараллеливанием вычислений. Была показана роль электронных корреляций в мишени (атом гелия), а также вклад отдельных механизмов реакции в различные кинематические области. Вклад механизма встрияски (shake off) виден в рассеянии электрона назад (против вектора скорости протона) и вполне описывается первым борновским приближением, тогда как механизм последовательного выбивания (sequential) дает вклад в рассеяние вперед и требует привлечения высших порядков теории возмущений. Работы опубликованы (*Phys. Rev. A* 87 (2013), 032715; 88 (2013), 042710).

Различные способы многомерного интегрирования, адаптированные к задачам многочастичной теории рассеяния, применялись и в ряде других задач, по которым получены важные результаты. В частности, используя математический аппарат нестационарной квантовой теории столкновений, были промоделированы возможные эффекты, связанные с формой волнового пакета падающей частицы в эксперименте по ионизации атома гелия в результате рассеяния на нем ультрапрелистического ядра углерода (M. Schulz et al., *Nature* 422 (2003) 48). Было показано, что форма волнового пакета ядра углерода не должна сказываться на измеряемых дифференциальных сечениях, в отличие от формы волнового пакета атома гелия (см. соответствующую дискуссию о «когерентных» пучках в *Phys. Rev. A* 86 (2012), 032710; 87 (2013), 046701; 046702).

Разработана и обоснована полуаналитическая модель взаимодействия лазерного импульса с атомом (молекулой), основанная на представлении кулонаовского потенциала суммой сепарабельных нелокальных потенциалов. В результате решена задача ионизации атома водорода лазерным импульсом произвольной формы и частоты. В частности, в области частот поля, близких к $1s - 2p$ переходам (т.н. Раби-осцилляции) обнаружен эффект аномально интенсивного испускания электронов высокой энергии. Подтверждён также ряд спектров ионизации, полученных ранее в рамках решения задачи путем разложения волновой функции в ряд по квадратично-интегрируемым базисным функциям. Соответствующие работы опубликованы в высокорейтинговых журналах (*Phys. Rev. A* 83 (2011), 013401; 87 (2013), 013420).

Рассчитанные угловые трехкратные дифференциальные сечения двукратной ионизации атома гелия быстрым электроном с использованием J-матрицы дали значительно лучшее согласие с экспериментом, чем расчеты в рамках так называемого сходящегося метода сильной связи каналов (CCC), J-матрица позволяет учесть кулонаовскую асимптотику обоих электронов и тем самым избежать псевдостостояний. Однако было установлено, что, несмотря на хорошее согласие теории с экспериментом, неполный учет асимптотики свободного члена уравнения делает схему неустойчивой при увеличении числа радиальных базисных функций в полном согласии с ранее проведенными нами исследованиями расходимости членов борновского ряда (ЭЧАЯ 42 (2011), 1311; *Phys. Rev. A* 83 (2011), 052708). Это привело к идее использовать метод J-матрицы для уравнения, записанного в параболических координатах, где удается избежать указанной трудности. Ряд исследователей в России, Аргентине, Африке сейчас активно продолжают данные исследования (см., например, Ядерная Физика 76 (2013), 398; *Physical Review A* 87 (2013), 022701 и др.).

В результате численного моделирование процессов электронной ударной ионизации атома водорода и модельной атомной системы «гармонический осциллятор» в присутствии линейно поляризованного лазерного излучения при условии высокой энергии налетающего электрона (1-2 КэВ) и большого значения переданного мишени импульса обнаружено, что даже при весьма умеренных значениях лазерных частоты и интенсивности, поле лазера может оказывать сильный эффект на зависимость дифференциального сечения рассеяния от импульса отдачи протона. Сформулированы кинематические критерии, при которых эффект волковских волн незначителен, что позволяет наиболее эффективно исследовать влияние лазерного поля на импульсные распределения в мишени.

Рассчитано многократное дифференциальное сечение ионизации молекулярных водорода и азота ударом быстрого электрона с помощью параксиального приближения. Для этого был использован метод, описанный в п. 1. Следует отметить, что параксиальное приближение в чистом виде (ПА) было применено для решения задачи ударной ионизации впервые, тогда как в наших более ранних работах оно использовалось только в сочетании с первым борновским приближением (ПА1Б). Наши результаты для ионизации электроном с энергией 550 эВ неориентированной молекулы водорода и молекулы азота с выбиванием электрона с внешних орбиталей очень хорошо согласуются с экспериментальными данными. Для ионизации ориентированной молекулы водорода электроном с энергией 200 эВ совпадение с экспериментом удовлетворительное. Однако, для ионизации с внутренней 2s_g орбитали молекулы азота хорошее совпадение с экспериментом получается при применении ПА1Б, но плохое при применении ПА. Последнее, как мы предполагаем, является следствием использования приближения одного активного электрона, то есть пренебрежения межэлектронными корреляциями в молекуле-мишени и изменением состояния остаточных электронов после взаимодействия с налетающим электроном. В рамках первого борновского приближения электрон мишени

приобретает достаточную для вылета энергию за однократное взаимодействие с падающим электроном и быстро покидает молекулу, так что остальные электроны мишени не успевают изменить свое состояние и таким образом приближение замороженного остова справедливо. Борновские члены высших порядков включают двухступенчатые процессы: после первой передачи импульса электрон мишени может оставаться в возбужденном состоянии (это наиболее вероятно для внутренних электронов, которые первоначально сильно связаны) и вылететь из молекулы только после последующего взаимодействия с налетающей частицей. Очевидно, что в течение первого этапа остальные электроны имеют время изменить свое состояние. Поскольку межэлектронные корреляции приводят к увеличению среднего межэлектронного расстояния, в случае применения приближения замороженного остова отталкивание вылетающего электрона остаточными электронами больше, чем в реальности. Таким образом, в промежуточном состоянии двухступенчатого процесса активный электрон фактически связан с молекулой сильнее, чем в рамках приближения замороженного остова, и в реальности вероятность его вылета из молекулы в ходе второго этапа меньше. Как следствие, приближение замороженного остова дает сильно завышенную оценку для ионизации посредством двухступенчатого процесса. В ПА1Б же такие процессы не учитываются вовсе. Именно поэтому, по-видимому, для ионизации с внутренней оболочки ПА1Б дает результаты, которые ближе к экспериментальным данным, чем ПА.

Численно определена зависимость углового распределения электронов, вылетевших при двойной однофотонной ионизации (ДФИ) молекулы водорода, от расстояния между ядрами (из-за квантовой неопределенности расстояние между ядрами в молекуле водорода может существенно отклоняться от равновесного). Показано, что при определенных значениях межядерного расстояния, зависящих от суммарной энергии вылетевших электронов, наблюдается минимум в полном сечении двукратной ионизации. Так же показано, что зависимость симметричной амплитуды ионизации от угла между направлениями вылетевших электронов при тех же значениях межядерного расстояния имеет сложный многогипсовый вид, в то время как при отклонении расстояния в большую или в меньшую сторону эта зависимость близка к гауссовой. Для объяснения наблюдаемых явлений были исследованы детали протекания одного из основных механизмов двойной ионизации одним фотоном - выбивания первичным электроном (который образуется за счет однократной фотоионизации) вторичного электрона. Для этого были по отдельности численно рассчитаны амплитуды двух стадий процесса: амплитуда однократной фотоионизации (ОФИ) молекулы H₂ и амплитуда ионизации иона молекулы водорода H₂₊ ударом электрона. Показано, что последняя зависит от расстояния между ядрами монотонно, а вышеописанные особенности зависимости характеристик ДФИ от межядерного расстояния объясняются наличием двухцентровой интерференции на первой стадии процесса, то есть ОФИ.

Рассмотрена временная задержка отрыва электрона от кулоновского центра в процессе ионизации. Показано, что аттосекундный стрикинг (оптический метод, наиболее часто используемый для измерения временной задержки ионизации), работает эквивалентно воображаемому детектору, измеряющему время прибытия частицы и размещенному на определенном расстоянии от центра системы. Данный подход позволяет вывести простую формулу для времени кулоновско-лазерного запутывания, дающую хорошее совпадение с результатами численного решения соответствующего временного уравнения Шредингера.

Изучены условия и механизмы возникновения больших положительных и отрицательных временных задержек вылета электронов в процессе ионизации двухатомных молекул аттосекундными лазерными импульсами. Показано, что для H₂ и H₂₊ сингулярности в угловой зависимости временной задержки возникают тогда, когда при определённом значении энергии амплитуды всех парциальных сфероидальных волн, кроме одной, обращаются в нуль, что соответствует так называемому куперовскому минимуму. Путём аналитического рассмотрения эволюции волнового пакета выбитого электрона продемонстрировано, что большие отрицательные значения производной от фазы по энергии не противоречат принципу причинности. Проанализирована зависимость временной задержки от энергии электрона для кулоновских сфероидальных волн с различными сфероидальными квантовыми числами.

Для изучения диссоциативной ионизации-возбуждения молекулы водорода ударом электрона применён метод внешнего комплексного скайлинга в вытянутых сфероидальных координатах (PS-ECS) в трёх вариантах. Для такой реакции в ходе недавнего эксперимента впервые одновременно регистрировались выбитый электрон и один из протонов. В первом варианте, PSECS-1B, два электрона мишени рассматривались из первых принципов, тогда как процессы, происходящие с налетающим и затем рассеянным электроном - с учётом первого члена борновского разложения. Во втором варианте, PSECS-2BCD, второй борновский член учитывается в дипольном приближении. В третьем варианте, PSECS-SW, использованном для расчёта ионизации-возбуждения с переходом в 2p_{1/2} состояние H₂₊, мишень описывается в рамках многоконфигурационного приближения одного активного электрона, а взаимодействие налетающего электрона с мишенью - из первых принципов. Полученные результаты частично согласуются с проводимыми в последнее время экспериментами.

Предложен метод извлечения амплитуд ионизации из решения временного уравнения Шредингера (ВУШ) для системы в переменном внешнем поле. Он представляет собой гибрид двух методов, разработанных ранее, - метода зависящего от времени потока через поверхность и метода, использующего распространяющийся волновой пакет в качестве члена-источника в стационарном уравнении Шредингера со свободным гамильтонианом. Показано, что данный метод сочетает преимущества своих предшественников и позволяет извлекать амплитуды ионизации, решая ВУШ на небольшой пространственной области (с обеспечением корректных граничных условий с помощью метода внешнего комплексного скайлинга) и для промежутка времени, не превышающего продолжительность действия внешнего поля.

В приближении эффективной массы и адабатическом представлении разработаны алгоритмы и проблемно-ориентированный комплекс программ для численного анализа характеристик электронных состояний сфероидальных и гантелеевидных моделей полупроводниковых квантовых точек в режиме сильного размерного квантования, используя разложение волновой функции по наборам однопараметрических базисных функций. Дано сравнение и учтены особенности спектральных и оптических характеристик моделей с осесимметричными запирающими потенциалами в зависимости от их геометрических размеров, используя полные наборы точных и адабатических квантовых чисел в соответствующих аналитических приближениях.

Разработаны символьно-численные алгоритмы и проблемно-ориентированный комплекс программ, реализованный на языках Maple и Фортран, для моделирования динамики ансамблей несферических квантовых точек в электрическом поле и других низкоразмерных водородоподобных квантовыхnanoструктур под воздействием сильных магнитных полей. Эффективность и точность разработанных алгоритмов, численных схем и комплекса программ, подтверждены вычислением собственных значений энергии, собственных функций, дипольных моментов и скоростей распада слабо возбуждённых Ридберговских состояний при высоких значениях |m| больше 200 у водородоподобного атома в лабораторных однородных магнитных полях В порядка 6Т. В приближении эффективной массы и в режиме сильного размерного квантования мы проанализировали коэффициенты поглощения для ансамблей сфероидальных квантовых точек с параболическим и непараболическим законами дисперсии, используя вычисленные собственные значения и собственные функции. Выявлены заметные различия в поведении коэффициентов поглощения для ансамбля сплюснутых и вытянутых сфероидальных квантовых точек с заданной функцией распределения значения малой полуоси, в

зависимости от отношения малой и большой полуосей сфероида и внешнего однородного электрического поля. Эти различия открывают возможность верификации рассмотренных моделей полупроводниковых квантовых точек и квантово-размерного эффекта Штарка.

Разработаны новый метод, эффективные и стабильные алгоритмы численного решения с заданной точностью параметрической двумерной краевой задачи на собственные значения (КЗС). Такая задача формулируется для самосопряженного эллиптического дифференциального уравнения в частных производных с краевыми условиями Неймана и/или Дирихле в конечной двумерной области. Исходная задача редуцируется к параметрической однородной одномерной КЗС для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) второго порядка. Редукция производится разложением искомого решения по подходящему набору ортогональных собственных функций вспомогательной задачи Штурма-Лиувилля по одной из переменных. Производные по параметру от собственных значений и соответствующих собственных вектор-функций редуцированной задачи определяются как решения параметрической неоднородной одномерной КЗС, полученной дифференцированием по параметру редуцированной задачи. Полученные КЗС решаются методом конечных элементов с автоматическим выбором сдвига спектра. Алгоритм, реализованный на Фортране 77 в виде программы POTHNEA, вычисляет с заданной точностью набор до 50 собственных значений (потенциальных термов), собственных функций и их первых производных по параметру, а также матричных элементов – интегралов от произведения собственных функций и/или первых производных собственных функций по параметру. Вычисленные потенциальные термы и матричные элементы можно использовать для формирования матрицы переменных коэффициентов системы ОДУ, которая возникает при редукции трёхмерной КЗС в рамках многоканального адиабатического подхода или метода Канторовича. Эффективность и стабильность алгоритма продемонстрирована численным анализом собственных решений параметрической двумерной КЗС и вычисленных матричных элементов, которые применяются при решении с помощью программы KANTBP трёхмерной КЗС для уравнения Шредингера для атома гелия с нулевым полным угловым моментом в гиперсферических координатах. С помощью разработанного комплекса программ POTHNEA и KANTBP выполнены расчёты спектральных характеристик составной кулоновской системы двух заряженных частиц в зависимости от параметров ограничивающих потенциалов осцилляторного типа, показывающие применимость развитого метода и комплекса программ для анализа экситонных систем в полупроводниковыхnanoструктурах.

Явление канализирования легких частиц в кристалле может быть использовано для ускорения частиц. Теоретически исследован метод ускорения легких положительно заряженных частиц (позитронов) лазерным полем в ондуляторе на основе периодически искривленного кристалла с учетом квантования поперечных степеней свободы частицы, канализированной в кристалле. Продольное движение канализируемой частицы рассматривается классическим образом. Расчеты показали, что из-за наличия больших ионизационных потерь данный метод ускорения эффективен только при применении сверхмощного лазерного излучения, которое разрушит кристалл. Оценки были сделаны для канализирования позитронов в кристалле кремния и углеродных нанотрубках.

Модель квантового туннелирования кластера, состоящего из A одинаковых частиц с осцилляторным взаимодействием, через короткодействующие отталкивающие барьерные потенциалы впервые сформулирована в представлении симметризованных координат и изучена в s-волновом приближении. Описан конструктивный метод построения симметричных/антисимметричных базисных функций (A - 1)-мерного гармонического осциллятора относительно перестановок координат тождественных частиц в новых симметризованных координатах. Анализируется эффект квантовой прозрачности, проявляющийся в немонотонной энергетической зависимости резонансного типа, проявляющейся коэффициента пропускания кластера через барьер в зависимости от числа A = 2, 3, 4 частиц и типа их симметрии. Показано, что резонансное поведение коэффициента похождения связано с существованием барьерных квазистационарных состояний, вложенных в континуум.

3.7.

Степень новизны полученных результатов

Все полученные и представленные в данном отчете результаты являются новыми. В частности:

На основе метода адаптивного подразбиения разработана корректная компьютерная программа девятимерного интегрирования, в том числе с быстроосциллирующими функциями. В отличие от ранее написанной аналогичной программы (группа Д. Мэдисона, ун-т Миссури-Ролла, США), наша работает устойчиво и дает корректные по величине результаты, в частности, при расчете реакции захвата электрона протоном из атома гелия, когда ион гелия остается в возбужденном состоянии. Комментарий по поводу американской программы опубликован (*Journal of Physics B: At. Mol. Opt. Phys.* 46 (2013) 028001).

- Впервые с помощью развитых нами методов многомерного интегрирования проведены расчеты измеренных дифференциальных сечений захвата электрона протоном в реакциях однократной перезарядки, перезарядки с возбуждением и ионизацией иона гелия в диапазоне энергий протона 630–1200 кэВ и углов рассеяния водорода в несколько миллирадиан. Расчеты проводились с использованием первого и второго борновских приближений, а также с искаженными волнами. Для расчетов использовались суперкомьютеры МГУ. Результаты расчетов удовлетворительно описывают эксперимент и позволяют сделать заключение о вкладе в сечение различных механизмов реакции и о пределах применимости первого борновского приближения.
- Приближение кулоновского потенциала конечным числом сепарабельных потенциалов тоже отличается новизной в применении к физике взаимодействия лазерного излучения с веществом. Впервые обнаружено плато в высокоэнергетической части спектра испущенного электрона в области частот поля, близких к энергии 1s-2p перехода, недостижимое для вычисления другими (традиционными) численными методами.
- Впервые сформулированы математически корректные, сходящиеся высшие борновские приближения для процессов квазиупругого выбивания электронов из атомов электронным ударом и впервые проведен расчет квазиупругой (e,2e) реакции на атоме водорода в рамках точного второго борновского приближения.
- Проведен первый систематический теоретический анализ экспериментальных данных по ионизации атома Не релятивистскими ионами углерода и впервые опубликованы конкретные значения для импульсного разрешения переданного импульса, которые могут объяснить известное расхождение между теорией и экспериментом.
- Впервые написана компьютерная программа для генерирования пробных коррелированных волновых функций атома гелия и других ионов с заполненной К-оболочкой как в основном, так и низколежащих возбужденных (метастабильных) состояниях. Программа использована для исследования влияния (ненулевого) импульса фотона на трехкратное дифференциальное сечение (TDCS) процесса двукратной ионизации фотоном легких атомов и ионов. Показана исключительная роль электронных корреляций на величину рассматриваемой поправки (*Phys. Rev. A*. 85 (2012), 023418)
- Впервые показано, что форма волнового пакета падающей частицы не играет принципиальной роли в проблеме ионизации атома Не релятивистскими ионами углерода и не может объяснить известное расхождение между теорией и

экспериментом.

- Впервые показано, что эффекты лазерного поля на асимптотически свободные электроны метода электронной импульсной спектроскопии (ионизации электронным ударом в режиме высокой энергии столкновения и большой передачи импульса) могут играть ведущую роль, кардинальным образом изменяя информацию об импульсном распределении электрона в мишени.

-Парааксиальное приближение для расчета многократного дифференциального сечения ионизации молекулярных водорода и азота ударом быстрого электрона в чистом виде было применено впервые, тогда как в наших более ранних работах оно использовалось только в сочетании с первым борновским приближением. В результате расчетов получен новый критерий проверки справедливости приближения замороженного остова во временном методе Хартри-Фока.

-Впервые продемонстрировано проявление двухцентровой интерференции в двойной фотоионизации молекулы водорода. Хотя непосредственно интерференция происходит на первом этапе процесса (т.е. при однократной фотоионизации), и для однократной фотоионизации молекулы водорода наличие двухцентровой интерференции теоретически показано давно, обнаруженная модуляция однократной ионизацией двойной ионизации позволяет наблюдать зависимость интерференционных эффектов от расстояния между ядрами экспериментально, поскольку после двойной ионизации потенциальная энергия отталкивания между оставшимися "голыми" протонами (зависящая от расстояния между ними в момент ионизации) полностью переходит в кинетическую энергию их движения, и измерение кинетической энергии вылетевших протонов позволяет определить начальное расстояние между ними.

-Для электронных (дырочных) уровней квантовых точек (КТ) сфероидальной формы применение адабатического подхода впервые позволило провести классификацию состояний и выявить их генеалогию при плавном переходе от вытянутых к сплюснутым пространственным распределениям потенциала КТ

-Предложена новая численно-аналитическая схема и компьютерная программа решения краевой задачи для уравнения Шредингера в цилиндрических координатах, которая описывает динамику примесных состояний квантовых проволок или водородоподобного атома в сильном однородном магнитном поле. Для анализа ридберговских состояний в магнитном поле $B = \gamma B_0 \sim t$ ($B_0 = 2.35 \cdot 10^5 T$) разработана схема теории возмущений позволяющая получать решения трёхмерной краевой задачи в аналитическом виде при больших $|m|$. В этом случае кулоновский потенциал рассматривается как возмущение к поперечным центробежному потенциалу m^2/ρ^2 и осцилляторному потенциалу с частотой $\omega_\rho = \gamma/2$, что приводит к аппроксимации продольного движения осцилляторным потенциалом с эффективной частотой ω_z и выделению адабатического параметра $\tilde{m} = (\omega_\rho / \omega_z)^{4/3} = |m|^{1/3}$. Этот параметр даёт априорную оценку интервала изменения $|m|$ с максимальными значениями скоростей распада ридберговских состояний и резонансного сечения фотоионизации, необходимую для проведения численных расчётов сильно делокализованных состояний.

-Разработаны новый метод, эффективные и стабильные алгоритмы численного решения с заданной точностью для параметрической двумерной краевой задачи на собственные значения.

-На основе рассчитанной зависимости углового распределения электронов, вылетевших при двойной однофотонной ионизации (ДФИ) молекулы водорода, от расстояния между ядрами обнаружены новые эффекты: 1) минимум в полного сечения двукратной ионизации при определенных значениях межъядерного расстояния, зависящих от суммарной энергии вылетевших электронов; 2) сложная многопиковая зависимость симметричной амплитуды ионизации от угла между направлениями вылетевших электронов при тех же значениях межъядерного расстояния, пропадающая при отклонении межъядерного расстояния в любую сторону. Впервые дана интерпретация этих эффектов на основе постдайного рассмотрения ДФИ..

-Впервые показано, что аттосекундный стрикинг (оптический метод, наиболее часто используемый для измерения временной задержки ионизации), работает эквивалентно воображаемому детектору, измеряющему время прибытия частицы и размещенному на определенном расстоянии от центра системы. С помощью данного подхода впервые получено новое простое аналитическое выражение для времени кулоновско-лазерного запускания, дающее хорошее совпадение с результатами прямого численного расчета.

-Впервые изучены условия и механизмы возникновения больших положительных и отрицательных временных задержек вылета электронов в процессе ионизации двухатомных молекул аттосекундными лазерными импульсами, выяснена природа сингулярности в угловой зависимости временной задержки и показано, что большие отрицательные значения производной от фазы по энергии не противоречат принципу причинности.

-Реакция диссоциативной ионизации-возбуждения молекулы водорода ударом электрона, недавно впервые исследованная экспериментально, промоделирована с помощью метода внешнего комплексного скейлинга в вытянутых сфероидальных координатах (PS-ECS) в трёх вариантах. Полученные результаты частично согласуются с новыми экспериментальными данными.

-Для извлечения амплитуд ионизации из решения временного уравнения Шредингера (ВУШ) для системы в переменном внешнем поле впервые предложена комбинация двух известных методов, разработанных ранее, и показано, что новый метод сочетает преимущества своих предшественников.

-Впервые исследовано влияние квантованности поперечной степени свободы канализированной частицы на ускорение лазерным полем легкой положительно-заряженной частицы в кристаллическом ондуляторе.

3.8. *Сопоставление полученных результатов с мировым уровнем*
Полученные результаты не только соответствуют мировому уровню, но в значительной степени определяют его. Они доложены на крупнейших международных конференциях, опубликованы в ведущих международных физических журналах (см. список публикаций ниже), половина участников проекта периодически работает в ведущих научных европейских коллективах и школах, входит в состав корпуса рецензентов ведущих научных журналов Европы и США.

3.9. *Методы и подходы, использованные в ходе выполнения проекта*

- Метод расчета двукратной ионизации лазерным импульсом основан на прямом численном решении шестимерного временного уравнения Шредингера (ВУШБМ). Для аппроксимации пространственной зависимости волновой функции использовалось представление дискретной переменной (ПДП). Предусмотрена возможность выбора оптимальной системы координат - сферической (в случае атома) или сфероидальной (в случае двухатомной молекулы). Для радиальной переменной использовалось ПДП на основе метода конечных элементов с узлами квадратур Гаусса-Лобатто. Для угловых переменных использовалось ПДП на основе сферических гармоник, ортогоанализированных на гауссовой

квадратуре. Для подавления нефизического отражения от границ сетки и получения амплитуды двойной ионизации из волнового пакета использовался метод времязависимого масштабирования координат. В процессе разработки были протестированы три метода аппроксимации временной эволюции: популярный в настоящее время в литературе метод Арнольди-Ланцша, метод расщепления и метод на основе дробно-рационального приближения Паде четвертого порядка с решением получившейся линейной системы с сильно разреженной матрицей с помощью метода сопряженных градиентов с прекондиционером. Сравнение методов показало, что метод Арнольди-Ланцша (даже высокого порядка аппроксимации) требует на порядок большего времени счета, чем остальные методы, из-за малости требующегося временного шага, а времена счета для приближения Паде четвертого порядка (трудоемкость выполнения шага в котором компенсируется возможностью очень больших шагов) и метода расщепления сравнимы между собой, с незначительным преимуществом последнего.

- Для расчета ионизации ударом быстрой заряженной частицей использовалось параксиальное приближение, сводящее (в случае одноэлектронной мишени) исходное шестимерное стационарное уравнение Шредингера, которое описывает падающую частицу и электрон мишени в поле иона-остова мишени, к пятимерному временному уравнению Шредингера (ВУШ5М). Для многоэлектронных мишеней использовалось одноэлектронное приближение (построенное на основе временного метода Хартри-Фока в комбинации с приближением замороженного остова), в котором помимо обычно учитываемого эффективного потенциала остова также учитывался приближенный оператор обмена (он был получен путем пренебрежения обменом для возбужденных состояний и состояний континуума). Численная схема, использованная для решения ВУШ5М, основана на методе расщепления. Для аппроксимации зависимости волновой функции от координат электрона мишени использовались те же методы на основе ПДП, что и при решении ВУШ5М. Нефизическое отражение от границ сетки подавлялось с помощью комплексного скейлинга. Извлечение амплитуды однократной вероятности из волновой функции проводилось с помощью Фурье-разложения потока вероятности через границу области счета.

- Для решения краевых задач, описывающих примесные состояния моделей полупроводниковыхnanoструктур: квантовых точек и квантовых проволок, в приближении эффективной массы, или водородоподобного атома в сильном однородном магнитном поле, используется метод Канторовича, сведения исходной задачи к краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка по продольной переменной. Эффективные потенциалы этих уравнений даны интегралами по поперечной переменной. Подынтегральные выражения даются произведениями базисных функций зависящих от продольной переменной, как от параметра и их первых производных по параметру. Для решения задачи при больших значениях магнитного квантового числа $|m|$, разработан алгоритм, реализованный в среде Maple, который позволяет получать аналитические выражения для эффективных потенциалов и матрицы поперечных дипольных моментов. Анализ сходимости разложения эффективных потенциалов позволяет определить область значений параметров: напряженности магнитного поля γ и магнитного квантового числа, в которой данное разложение применимо, $|m| \gamma^{-1/3} \tilde{m}^6$. В противном случае матричные элементы вычисляются программой, реализующей метод конечных элементов высокого порядка точности. Решение краевой задачи для системы обыкновенных дифференциальных уравнений также реализуется методом конечных элементов высокого порядка точности.

- Многократное дифференциальное сечение двойной фотоионизации молекулы водорода рассчитывалось путем прямого численного решения шестимерного стационарного уравнения Шредингера с правой частью при помощи метода внешнего комплексного скейлинга в сфероидальных координатах (PSECS). Впервые был применен оригинальный метод анализа процесса ДФИ, основанный на точном численном расчете амплитуд каждой из его стадий. Амплитуды стадий (однократной фотоионизации H₂ и ионизации остаточного иона H₂⁺ ударом быстрого электрона) так же вычислялись с помощью PSECS.

- Некоторые открытые (<http://crantastic.org/packages/adapt>) и коммерческие (<http://www.stat.duke.edu/courses/Spring02/sta376/eg/lc/dcuhre.f>, <http://www.nag.com/>) фортрановские программы, написанные на основе т.н. метода аддитивного подразбиения (adaptive subdivision method), были нами существенно модифицированы, что позволяет обрабатывать больший объем информации в оперативной памяти, использовать комплексные числа и проводить параллельные вычисления. Эти программы позволяют проводить расчеты некоторых многомерных интегралов квантовой теории многочастичного рассеяния и являются альтернативными стандартному методу последовательного интегрирования, который приводит зачастую к огромным численным ошибкам.

- В задаче приближения кулоновского потенциала конечным числом сепарабельных потенциалов, поддерживающих нижние связанные состояния атома (молекулы), требуется решать конечную систему связанных интегральных уравнений Вольтерра 1го порядка. Она перешлась по методу Линца (P. Linz, Analytical and Numerical Methods for Volterra Equations (SIAM, Philadelphia, 1985)) с некоторыми доработками, связанными со слабой сингулярностью ядер уравнений.

- Волновая функция гелия для двух электронов в континууме исследовалась с помощью интегральных уравнений Фаддеева-Меркурева. где в качестве свободного члена использовалось произведение двух кулоновских волн с разными (постоянными) зарядами. Далее использовалось стандартное разложение всех входящих в уравнение функций по базисам бисферических полиномов и лаггеровских базисных функций с последующим обрезанием матриц коэффициентов разложения. Особо следует отметить новый элемент теории, а именно интегрирование свертки двухчастичных кулоновских функций Грина по переменной энергии, что именно и приводит к правильным "кулоновским хвостам" у двухчастичных волновых функций и отказу от использования псевдосостояний. Этот подход был подробно описан ранее (Ядерная Физика 69 (2006), 276; 70 (2007), 706; Phys. Rev. A 75 (2007), 022718) и нашел свое продолжение в публикациях авторов в 2011 – 13 гг.

- Для перенормировки расходящегося борновского ряда в случае кулоновского раз渲а использовалась связь между точной t-матрицей задачи и сингулярным решением соответствующего уравнения Липпмана-Швингера на поверхности энергии (ЭЧАЯ, 41, (2010), 607). В случае квазиупругого выбивания электрона из атома водорода электронным ударом интегрирование регуляризованных членов второго борновского приближения проводилось как аналитически, используя известный метод Льюиса, так и численно.

- Расчет ионизации атома гелия релятивистскими ионами углерода проводился в первом и втором борновских приближениях, а также в борновском приближении искаженных волн. Основное состояние гелия моделировалось произведением двух водородоподобных 1s-орбиталей с эффективным зарядом, определяемым из вариационной процедуры. Конечное состояние гелия выбиралось как произведение кулоновской волны (для эжектированного электрона) и 1s-орбитали иона He⁺. Интегралы второго борновского приближения вычислялись в контактном приближении. Искажение падающей и уходящей волн (для иона C₆⁺) учитывалось в эйкональном приближении. Моделирование эффектов конечного экспериментального разрешения проводилось посредством конволюции дифференциального сечения, рассчитанного в первом борновском приближении, с двумерной гауссовой функцией переданного импульса. Моделирование эффектов «когерентности» начального пучка ядер углерода проводилось с

помощью конволюции дифференциального сечения с волновым пакетом падающей частицы в предположении высокой степени локализации последнего в пространстве скоростей.

- Расчет дифференциального сечения процесса ионизации атома в присутствии электрического поля лазера проводился в рамках борновского приближения по электрон-электронному взаимодействию. При этом состояния налетающего, рассеянного и эжецированного электронов описывались волковскими волнами, т.е. решениями нерелятивистского уравнения Шредингера с вектор-потенциалом плоской электромагнитной волны. Результирующее выражение для дифференциального сечения сводилось к произведению некоторой аналитической функции и функции Бесселя целого порядка. Далее в численных расчетах использовались стандартные алгоритмы вычисления функций Бесселя целого порядка.

- В задаче численного моделирования (e_1e_2e) процесса на поверхности твердого тела в результате неупругого рассеяния первичного электрона использованы следующие основные ингредиенты: 1) электронная структура образца, описывается с помощью метода Корринги-Кона-Ростокера [Korringa J., Physica 13, 342 (1947); Kohn W. and Rostoker N., Phys. Rev. 94, 1111 (1954)]; 2) состояния налетающего, рассеянного и эжецированного электронов определяются в рамках динамической теории дифракции медленных электронов [Pendry J. B., Low Energy Electron Diffraction (Academic Press, New York, 1974)]; 3) экранированный кулоновский потенциал между электронами дается решением уравнения Дайсона, в котором поляризационная функция вычисляется в рамках приближения случайных фаз.

- Рассмотрение механизмов, вызывающих появление временных задержек вылета электронов в процессе ионизации молекул ультракороткими лазерными импульсами, проводилось путем аналитического рассмотрения эволюции волнового пакета вылетевшего электрона. При этом понятие вигнеровского времени задержки, первоначально введенное для короткодействующих потенциалов, было обобщено на случай кулоновского потенциала. Основываясь на эквивалентности аттосекундного стрикинга воображаемому детектору, размещенному на определенном расстоянии от ионизируемого объекта, удалось описать ранее обнаруженное другими авторами кулоновско-лазерное запутывание с помощью простой аналитической формулы, обеспечивающей хорошее воспроизведение результатов численного расчета.

- Для численного анализа характеристик электронных состояний сфероидальных и гантлевидных моделей полупроводниковых квантовых точек в режиме сильного размерного квантования использовалось приближение эффективной массы и адиабатическое представление. Для реализации подхода разработаны алгоритмы и проблемно-ориентированный комплекс программ, использующие разложения волновой функции по наборам однопараметрических базисных функций.

- Для моделирования динамики ансамблей несферических квантовых точек в электрическом поле и других низкоразмерных водородоподобных квантовыхnanoструктур под воздействием сильных магнитных полей разработаны символьно-численные алгоритмы и проблемно-ориентированный комплекс программ, реализованный на языках Maple и Фортран.

- Новый метод, реализованный в виде эффективных и стабильных численных алгоритмов, обеспечивающих заданную точность, разработан для решения параметрической двумерной краевой задачи на собственные значения (КЗСЗ) для самосопряженного эллиптического дифференциального уравнения в частных производных с краевыми условиями Неймана и/или Дирихле в конечной двумерной области. Разложением искомого решения по подходящему набору ортогональных собственных функций вспомогательной задачи Штурма-Лиувилля по одной из переменных исходная задача редуцируется к параметрической однородной одномерной КЗСЗ для системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) второго порядка. Производные по параметру от собственных значений и соответствующих собственных вектор-функций редуцированной задачи определяются как решения параметрической неоднородной одномерной КЗСЗ, полученной дифференцированием по параметру редуцированной задачи. Полученные КЗСЗ решаются методом конечных элементов с автоматическим выбором сдвига спектра. С помощью разработанного комплекса программ POTHNEA и KANTWB выполнены расчёты, показывающие применимость развитого метода и комплекса программ для анализа экситонных систем в полупроводниковых nanoструктурах.

- Для расчета ускорения легких заряженных частиц в периодически искривленном кристалле поперечным полем лазерного луча, с помощью метода Петрова-Галеркина из временного уравнения Шредингера было получена система уравнений, описывающих продольную степень свободы канализированной частицы в рамках классического приближения, а поперечную – в рамках квантовой механики. Приближенные выражения для зависимости ускорения частицы от частоты "поперечного" перехода и интенсивности лазерного поля получены из этих уравнений с помощью двухуровневого приближения.

3.10.1.1. Количество научных работ, опубликованных в ходе выполнения проекта
63

3.10.1.2. Из них включенных в перечень ВАК
45

3.10.1.3. Из них включенных в системы цитирования (Web of science, Scopus, Web of Knowledge, Astrophysics, PubMed, Mathematics, Chemical Abstracts, Springer, Agris, GeoRef)
40

3.10.2. Количество научных работ, подготовленных в ходе выполнения проекта и принятых к печати в 2013 г.
2

3.11. Участие в научных мероприятиях по тематике проекта, которые проводились при финансовой поддержке Фонда
3

3.12. Участие в экспедициях по тематике проекта, проводимых при финансовой поддержке Фонда
0

3.13. Финансовые средства, полученные от РФФИ
1195000 руб.

3.14. Адреса (полностью) ресурсов в Internet, подготовленных авторами по данному проекту
0

3.15. Библиографический список всех публикаций по проекту
Статьи в журналах

1. Serov V.V. Calculation of intermediate-energy electron-impact ionization of molecular hydrogen and nitrogen using the paraxial approximation. Phys. Rev. A, 84 (6), 062701-1–062701-8 (2011).

2. H.M. Tetchou Nganso, Yu. V. Popov, B. Piraux, J. Madronero, M. G. Kwato Njock. Ionization of atoms by strong infrared fields: Solution of the time-dependent Schrödinger equation in momentum space for a model based on separable potentials.

3. Ю.В. Попов, С.А. Зайцев, С.И. Виницкий. Ј-матричный метод вычисления трёхчастичных кулоновских волновых функций и сечений физических процессов. Физика элементарных частиц и атомного ядра, 42, 1311-1370 (2011).
4. M. Silenou Mengoue, M.G. Kwato Njock, B. Piraux, Yu.V. Popov, S.A. Zaitsev, Electron impact double-ionization of He by applying the Jacobi matrix approach to the Faddeev-Merkuriev equations. Physical Review A, 83, 052708-1—052708-11 (2011).
5. Зайцев С.А., Попов Ю.В. Кныр В.А. Решение задачи двукратной ионизации атома гелия в Ј-матричном подходе. Вестник Санкт-Петербургского университета 4: физика, химия (1), 115-119 (2011).
6. K. A. Kouzakov, Yu.V. Popov, M. Takahashi, Theory of laser-assisted electron momentum spectroscopy: Beyond the Volkov wave Born approximation. Journal of Physics: Conference Series, 288, 012009 (2011).
7. A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S. I. Vinitsky, K. G. Dvoyan, E. M. Kazaryan, H. A. Sarkisyan, V. L. Derbov, A. S. Klombotskaya, V. V. Serov, Adiabatic description of nonspherical quantum dot models. Ядерная Физика, 75, 1281-1297 (2012) [Physics of Atomic Nuclei, 75 (10), 1210-1226 (2012)].
8. Серов В. В., Сергеева Т.А. Лазерное ускорение легких частиц, канализированных в периодически модулированных кристаллах // Вестник Российского университета дружбы народов, Математика, информатика, физика, 4, 53-67 (2012).
9. Zhanlav T., Chuluunbaatar O. A local and semilocal convergence of the continuous analogy of Newton method. Вестник Российской университета дружбы народов. Серия: математика, информатика, физика, 1, 34-43 (2012).
10. Gusev A.A., Vinitsky S.I., Chuluunbaatar O., Gerdt V.P. Hai L.L., Rostovtsev V.A. Symbolic-numerical calculations of high-|m| Rydberg states and decay rates in strong magnetic fields. Lecture Notes in Computer Science, 7442, 155-171 (2012).
11. Galstyan A.G., Chuluunbaatar O., Popov Yu.V., Piraux B. Effects of photon momentum in nonrelativistic (γ , 2e) processes. Phys. Rev. A, 85, 023418-1—023418-5 (2012).
12. Hong-Keun Kim, M. S. Schoeffler, S. Houamer, O. Chuluunbaatar, J. N., Titze, L. Ph. H. Schmidt, T. Jahnke, H. Schmidt-Boecking, A. Galstyan, Yu.V. Popov, and R. Doerner. Electron transfer in fast proton-helium collisions. Phys. Rev. A, 85 (2), 022707-1—022707-10 (2012).
13. Chuluunbaatar O., Gusev A.A., Joulakian B. The correlated two-centre double continuum and the double ionization of H₂ and N₂ by fast electron impact. Journal of Physics B: Atomic Molecular and Optical Physics, 45 (1), 015205-1—015205-6 (2012).
14. Bulychev A.A., Kouzakov K.A., Popov Yu.V. The role of Volkov waves in laser-assisted electron momentum spectroscopy. Physics Letters A, 376, 484-487 (2012).
15. Kouzakov K.A., Berakdar J. Plasmon-assisted electron-electron collisions at metallic surfaces // Physical Review A, 85, 022901-1—022901-12 (2012).
16. Kouzakov K.A., Zaytsev S.A., Popov Yu.V., Takahashi M. Singly ionizing 100-MeV/amu C6+ + He collisions with small momentum transfer. Physical Review A, 86, 032710-1—032710-8 (2012).
17. Serov V.V., Ivanov I.A., Kheifets A.S. Single-photon double ionization of H₂ away from equilibrium: A showcase of two-center electron interference. Phys. Rev. A, 86, 025401-1—025401-4 (2012).
18. Chuluunbaatar O., Joulakian B. Theoretical study of the simple (e,e2e) ionization of the 1\pi_g molecular level of CO₂ by the introduction of a three-center continuum wave function. Journal of Physics: Conference Series, 388, 052078(1)—052078(1) (2012).
19. Chuluunbaatar O., Bachau H., Popov Yu.V., Piraux B. Closure approximation in the theory of two-photon double ionization of atoms. Journal of Physics: Conference Series, 388, 032004(1)-032004(1) (2012).
20. Kouzakov K.A. Bulychev A.A., Popov Yu.V., Takahashi M. Laser-assisted electron-impact ionization of atoms at high impact energy and large momentum transfer. Journal of Physics: Conference Series, 388, 112001(1)-112001(1) (2012).
21. H.M. Tetchou Nganso, Yu.V. Popov, B. Piraux, J. Madronero, M.G. Kwato Njock. Interaction of atomic hydrogen with a UV pulse: model based calculations of the energy transfers from the laser field into both the electron kinetic energy and the harmonics. Journal of Physics: Conference Series, 388, 032005(1)-032005(1) (2012).
22. S. Houamer, Yu.V. Popov, C. Dal Cappello. Transfer ionization process in collision of fast protons with helium at milliradian scattering angles. Journal of Physics: Conference Series, 388, 082020(1)-082020(1) (2012).
23. Serov V.V., Joulakian B.B. The external complex scaling method in prolate spheroidal coordinates for the electron impact ionization of molecular hydrogen // Journal of Physics: Conference Series, 388, 052039(1)-052039(1) (2012).
24. A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, L.L. Hai, S.I. Vinitsky, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan, V.L. Derbov. Spectral and optical characteristics of spheroidal quantum dots. Journal of Physics: Conference Series, 393, 012011(1)-012011(9) (2012).
25. Vladislav V. Serov, Vladimir L. Derbov, Tatyana A. Sergeeva. Interpretation of time delay in the ionization of two-center systems. Physical Review A, 87 (6), 063414-1—063414-10 (2013).
26. Vladislav V. Serov, Vladimir L. Derbov, Tatyana A. Sergeeva, Sergue I. Vinitsky. Hybrid surface-flux method for extraction of the ionization amplitude from the calculated wave function. Physical Review A, 88 (4), 043403-1—043403-7 (2013).
27. V.V. Serov. Ab Initio Calculation of Double Ionization of Atoms. Nuclei Theory (2013) 76 (2), 147-154.
28. В.В. Серов, В.Л. Дербов, Т.А. Сергеева, С.И. Виницкий. Современные методы расчета фотоионизации и ионизации электронным ударом двухэлектронных атомов и молекул. Физика элементарных частиц и атомного ядра 44 (4), 1432-1499 (2013).
29. Schoeffler M.S., Chuluunbaatar O., Popov Yu V., Houamer S., Titze J., Jahnke T., Schmidt L.Ph H, Jagutzki O., Galstyan A.G., Gusev A.A. Transfer ionization and its sensitivity to the ground-state wave function. Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics 87 (3), 032715-1—032715-6 (2013).
30. Schoeffler M.S., Chuluunbaatar O., Houamer S., Galstyan A., Titze J.N., Schmidt L.Ph H, Jahnke T., Schmidt-Boecking H., Popov Yu V., Doerner R., Gusev A.A., Dal Cappello C. Two-dimensional electron-momentum distributions for transfer ionization in fast proton-helium collisions. Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics 88, 042710-1—042710-7 (2013).
31. Konstantin A. Kouzakov, Sergey A. Zaytsev, Yuri V. Popov, Masahiko Takahashi. Reply to "Comment on 'Singly ionizing 100-MeV/amu C6+ + He collisions with small momentum transfer'." Physical Review A, 87, 046702-1—046702-2 (2013).
32. J. Lecointre, K. A. Kouzakov, D. S. Belic, P. Defrance, Yu. V. Popov, V. P. Shevelko. Multiple ionization of C+, N+ and O+ ions by fast electron impact. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 46, 205201-1—205201-11 (2013).
33. S.A. Zaytsev, Yu. V. Popov, B. Piraux. Parabolic Sturmians approach to the three-body continuum coulomb problem. Ядерная физика 76 (3), 398-408 (2013).
34. S. Houamer, Yu.V. Popov. Comment on "Four-body charge transfer processes in proton-helium collisions. Journal of Physics B: At. Mol. Opt. Phys. 46 (2), 028001-1—028001-3 (2013).
35. H.M. Tetchou Nganso, A. Hamido, M.G. Kwato Njock, Yuri V. Popov, B. Piraux. Interaction of a model atom exposed to strong laser pulses: Role of the Coulomb potential. Physical Review A 87 (1), 013420-1—013420-9 (2013).
36. A. Gusev, S. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, V.A. Rostovtsev, L.L. Hai, V. Derbov, A. Gozdz and E. Klimov. Symbolic-numerical algorithm for generating cluster eigenfunctions: identical particles with pair oscillator interactions. Lecture Notes in Computer Science 8136, 155-168 (2013).
37. A. Gusev, S. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, V.A. Rostovtsev, L.L. Hai, V. Derbov and P. Krassovitskiy. Symbolic-numerical algorithm for generating cluster eigenfunctions: tunneling of clusters through repulsive barriers. Lecture Notes in Computer Science 8136, 427-441 (2013).
38. O. Chuluunbaatar, A.A.Gusev, B. B. Joulakian. The Double Ionization of H₂ by Fast Electron Impact: Influence of the Final State Electron-Electron Correlation. Physics of Atomic Nuclei 76 (2), 121-125 (2013).
39. А.А.Гусев, С.И. Виницкий, О. Чулуунбаатар, Г.М. Красовицкий. Резонансное туннелирование пары связанных частиц в адиабатическом представлении. Вестник МГТУ Станклин 1 (24), 92-97 (2013)

40. A. A. Bulychev, O. Chuluunbaatar, A. A. Gusev, B. Joulakian. (γ , 2e) photo-double ionization of N₂ molecules for equal energy sharing. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 46, 185203-1–185203-9 (2013).
41. A.A. Gusev. The Algorithms of the Numerical Solution to the Parametric Two-Dimensional Boundary-Value Problem and Calculation Derivative of Solution with Respect to the Parameter and Matrix Elements by the Finite-Element Method. *Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика»* №4, 101-121 (2013).
42. Gusev A.A., Hai L.L., Vinitsky S.I., Chuluunbaatar O., Derbov V.L., Klombotskaya A.S., Dvoyan K.G., Sarkisyan H.A. Analytical and numerical calculations of spectral and optical characteristics of spheroidal quantum dots. *Ядерная Физика* 76 (8), 1033-1055 (2013).
43. Э. М. Казарян, В. А. Шахназарян, А. А. Саркисян, А. А. Гусев. Квантовая модель томсоновского атома гелия. *Письма в ЭЧАЯ* (2014) (принято к печати).
44. A. A. Gusev, S. I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, L. L. Hai, V. L. Derbov, A. Gozdz, P. M. Krassovitskiy. Resonant tunneling of a few-body cluster through repulsive barriers. *Ядерная физика* 77 (2014) (принято к печати).

Материалы конференций

45. Kouzakov K.A., Bulychev A.A., Popov Yu.V., Takahashi M. Laser-assisted electron-impact ionization of atoms at high impact energy and large momentum transfer. Abstracts of contributed papers to XXVII ICPEAC (Belfast, UK, 2011) 2011, We113.
46. Kouzakov K.A., Popov Yu.V., Vinitsky P.S. Second Born effects in electron momentum spectroscopy, Abstracts of contributed papers to XXVII ICPEAC (Belfast, UK, 2011) 2011, Fr020.
47. Kouzakov K.A. Bulychev A.A., Popov Yu.V., Takahashi M. Laser-assisted electron-impact ionization of atoms at high impact energy and large momentum transfer. Abstracts of International Symposium on (e,2e), Double Photoionization and Related Topics & 16th International Symposium on Polarization and Correlation in Electronic and Atomic Collisions (Dublin, Ireland, 2011) 2011, p. 71.
48. Kouzakov K.A., Popov Yu.V., Shablov V.L. Peculiarities of the Born series in electron impact ionization processes. Abstracts of International Symposium on (e,2e), Double Photoionization and Related Topics & 16th International Symposium on Polarization and Correlation in Electronic and Atomic Collisions (Dublin, Ireland, 2011), 2011, 60.
49. O. Chuluunbaatar, H. Bachau, Yu.V. Popov, B. Piraux. Closure approximation in the theory of two-photon double ionization of atoms. Abstracts of contributed papers to XXVII ICPEAC (Belfast, UK, 2011), We134 (2011).
50. H.M. Tetchou Nganso, Yu.V. Popov, B. Piraux, J. Madronero, M.G. Kwato Njock. Interaction of atomic hydrogen with an UV pulse: model based calculations of the energy transfers from the laser field into both the electron kinetic energy and the harmonics. Abstracts of contributed papers to XXVII ICPEAC (Belfast, UK, 2011), We135 (2011).
51. S. Houamer, Yu.V. Popov, C. Dal Cappello, Transfer ionization process in collision of fast protons with helium at milliradian scattering angles, Abstracts of contributed papers to XXVII ICPEAC (Belfast, UK, 2011), Th047 (2011).
52. O. Chuluunbaatar, H. Bachau, Yu.V. Popov, B. Piraux. Closure approximation in the theory of two-photon double ionization of atoms. Program and abstracts of International Symposium on (e,2e), Double Photoionization and Related Topics & 16th Int. Symposium on Polarization and Correlation in Electronic and Atomic Collisions (Dublin, Ireland, 2011), 57 (2011).
53. G. Galstyan, O. Chuluunbaatar, Yu.V. Popov, B. Piraux. Non-dipole effects in (γ , 2e) processes caused by photon momentum. Abstracts EGAS'44 (Gothenburg, Sweden, 2012), 2012, v. 36, p. 183.
54. Vladimir L. Derbov, Vladislav V. Serov, Tatyana A. Sergeeva. Interpretation of the ultrafast optical measurements of time delay in the ionization of Coulomb systems. International Conference on Advanced Optoelectronics and Lasers (CAOL), 2013, Institute of Electrical and Electronics Engineers, pp. 271-274 (2013)
55. Andrey A. Bulychev, Konstantin A. Kouzakov, Yuri V. Popov. Effects of Volkov functions in laser-assisted electron momentum spectroscopy. Proceedings of SPIE, 8699, 86991B-1-86991B-8 (2013)
56. M. S. Schoeffler, O. Chuluunbaatar, Yu. V. Popov, S. Houamer, J. Titze, T. Jahnke, L. Ph. H. Schmidt, O. Jagutzki, A. G. Galstyan, A. A. Gusev. 2D momentum distribution of electron in transfer ionization of helium atom by fast proton. Abstracts of contributed papers to XXVIII ICPEAC, Lanzhou, China, 2013, Paper No. MoP81
57. M. S. Schoeffler, O. Chuluunbaatar, S. Houamer, J. Titze, T. Jahnke, L. Ph. H. Schmidt, A. G. Galstyan, Yu. V. Popov, Transfer excitation reactions in fast proton-helium collisions. Abstracts of contributed papers to XXVIII ICPEAC, Lanzhou, China, 2013, Paper No. MoP82.
58. M. S. Schoeffler, O. Chuluunbaatar, S. Houamer, J. Titze, T. Jahnke, L. Ph. H. Schmidt, A. G. Galstyan, Yu. V. Popov. Transfer excitation reactions in fast proton-helium collisions. Abstracts ECAMP'11, Aarhus, Denmark, 2013, Paper No. Mo-T2-3.
59. M. S. Schoeffler, O. Chuluunbaatar, Yu. V. Popov, S. Houamer, J. Titze, T. Jahnke, L. Ph. H. Schmidt, O. Jagutzki, A. G. Galstyan, A.A. Gusev. 2D momentum distribution of electron in transfer ionization of helium atom by fast proton. Abstracts ECAMP'11, Aarhus, Denmark, 2013, Paper No. Mo-T2-4.
60. A. A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S. I. Vinitsky, A. G. Abrashkevich. POTHET: a program for computing effective potentials, energy levels and wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach. Mathematical Modeling and Computational Physics, 2013. Book of abstracts, ОИЯИ, 2013, с. 94-95.
61. Derbov, V.L. , Klombotskaya, A.S., Gusev, A.A. , Hai, L.L., Vinitsky, S.I., Chuluunbaatar, O. Calculations of spectral and optical characteristics of spheroidal quantum dot ensembles. *Progress in Biomedical Optics and Imaging - Proceedings of SPIE* 8699, Article No. 86991A (2013).

Прочие

62. Yu.V. Popov, V.L. Shablov, K.A. Kouzakov, and A.G. Galstyan. Comment on "Dynamics of transfer ionization in fast ion-atom collisions" arXiv:1304.3045v2 [physics.atom-ph] (2013) (направлено в Physical Review A).
63. M. S. Schoeffler, H.-K. Kim, O. Chuluunbaatar, S. Houamer, A.G. Galstyan, J. N. Titze, T. Jahnke, L. Ph. H. Schmidt, H. Schmidt-Boecking, R. Doerner, Yu. V. Popov, and A. Bulychev. Transfer excitation reactions in fast proton-helium collisions. arXiv:1311.5660 [physics.atom-ph] (2013) (направлено в Physical Review A).

- 3.16. *Приоритетное направление развития науки, технологий и техники РФ, в котором, по мнению исполнителей, могут быть использованы результаты данного проекта*
индустрия наносистем
- 3.17. *Критическая технология РФ, в которой, по мнению исполнителей, могут быть использованы результаты данного проекта*
Компьютерное моделирование наноматериалов, наноустройств и нанотехнологий
- 3.18. *Основное направление технологической модернизации экономики России, которому, по мнению исполнителей, соответствуют результаты данного проекта*
не очевидно