

**SCIENTIFIC COUNCIL DSc.03/31.03.2022.T/FM.10.04 ON AWARD OF A  
SCIENTIFIC DEGREE AT THE INSTITUTE OF FUNDAMENTAL AND  
APPLIED RESEARCH UNDER THE  
NATIONAL RESEARCH UNIVERSITY “TIAME”**

---

**INSTITUTE OF FUNDAMENTAL AND APPLIED RESEARCH**

**KIM VYACHESLAV VALENTINOVICH**

**STUDY OF IONIZATION AND HIGH-ORDER HARMONICS  
GENERATION IN LASER-INDUCED PLASMAS  
BY ULTRASHORT PULSES**

**01.04.02 – Theoretical physics  
(physical and mathematical sciences)**

**PRESENTATION**

on awarding the scientific degree of Doctor of Philosophy (PhD)  
on the basis of published papers without  
a dissertation defence

**Tashkent – 2023**

Taqdimnoma mundariyasi  
Оглавление представления  
Content of the thesis of presentation

**Kim Vyacheslav Valentinovich**

Study of ionization and high-order harmonics generation in laser-induced plasmas by ultrashort pulses..... 3

**Kim Vyacheslav Valentinovich**

Ultraqisqa impulslar yordamida lazer plazmalarda ionlanish va yuqori tartibli garmonik hosil bo'lishini o'rganish..... 43

**Ким Вячеслав Валентинович**

Исследование ионизации и генерации высших гармоник сверхкоротких импульсов в лазерной плазме ..... 87

## Эълон қилинган ишлар рўйхати

List of published works

Список опубликованных работ ..... 95

**SCIENTIFIC COUNCIL DSc.03/31.03.2022.T/FM.10.04 ON AWARD OF A  
SCIENTIFIC DEGREE AT THE INSTITUTE OF FUNDAMENTAL AND  
APPLIED RESEARCH UNDER THE  
NATIONAL RESEARCH UNIVERSITY “TIAME”**

---

**INSTITUTE OF FUNDAMENTAL AND APPLIED RESEARCH**

**KIM VYACHESLAV VALENTINOVICH**

**STUDY OF IONIZATION AND HIGH-ORDER HARMONICS  
GENERATION IN LASER-INDUCED PLASMAS  
BY ULTRASHORT PULSES**

**01.04.02 – Theoretical physics  
(physical and mathematical sciences)**

**PRESENTATION**

on awarding the scientific degree of Doctor of Philosophy (PhD)  
in theoretical physics on the basis of published papers  
without a dissertation defence

**Tashkent – 2023**

**The theme of the PhD research is registered by the Supreme Attestation Commission at the Ministry of Higher Education, Science and Innovations of the Republic of Uzbekistan under B2023.2.PhD/FM859.**

The research work results have been carried out at the Institute of Fundamental and Applied Research under "TIAMEE" National Research University.

Presentation of scientific research in three languages (Uzbek, English and Russian (only conclusions)) is posted on the websites of the Scientific Council ([www.ifar.uz](http://www.ifar.uz)), National News Agency ([www.uza.uz](http://www.uza.uz)) and Information-educational portal "Ziyonet" ([www.ziyonet.uz](http://www.ziyonet.uz)).

**Scientific consultant:**

**Ganeev Rashid Ashirovich**

doctor of sciences in physics and mathematics, professor  
University of Latvia, Riga, Latvia

Presentation of the scientific research will be held on " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2023 at \_\_\_\_ in the meeting of the Scientific Council No. **DSc.03/31.03.2022T/FM.10.04** at the Institute of Fundamental and Applied Research under the "TIAMEE" National Research University (Address: 100000, Tashkent city, Qori Niyazov Street 39, Institute of Fundamental and Applied Research, Hall 312; tel.: 71 237-09-61.; e-mail: [info@ifar.uz](mailto:info@ifar.uz))

The PhD presentation can be looked through at the Information Resource Center of the Institute of Fundamental and Applied Research under the "TIAMEE" National Research University (registered under № \_\_\_\_). (Address: 100000, Tashkent city, 39 Qori Niyazov str., ph.: 71 237-09-62)

The presentation of the scientific research was distributed on " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_, 2023.

(Registry record № \_\_\_\_ dated " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_, 2023)

**B.J. Ahmedov**

Chairman of the Scientific Council  
on Award of Scientific Degrees,  
DSc, Professor

**E.X. Karimbayev**

Scientific Secretary of Scientific Council  
on Award of Scientific Degrees, PhD

## INTRODUCTION (presentation abstract)

**Relevance and necessity of the topic.** The development of laser sources of fast and ultrashort pulse durations within the range from a few tens' optical cycles down to a single optical cycle has allowed the reaching of light field intensities in  $10^{14}$  to  $10^{20}$   $\text{Wcm}^{-2}$ . In these conditions, vast new strong-field phenomena are raised, associated with laser-induced multiphoton processes, such as above-threshold ionization, high-order harmonics generation, and so on. The ionization behaviour of various materials in strong laser fields and its detailed understanding are of fundamental interest since the initial single-ionization process is a prerequisite to the subsequent evolution of the quantum systems in the driving laser field. Additionally, the strong-field process under consideration plays a fundamental role in areas such as photocatalysis and the surface photochemistry of nanoparticles. The absorption of light by nanoparticles can lead to electron transfer to molecules adsorbed to the particle surface and initiate molecular reactions. The microscopic details of surface photochemistry largely determine the impact on biological systems. For example, irradiated metal nanoparticles have been used extensively for the imaging and treatment of cancer, thermally controlled local delivery of active molecules and aerosolized mesoporous dielectric nanoparticles containing drugs showed promise toward treatment of respiratory symptoms. The development of effective sources of coherent extreme ultraviolet (XUV) radiation is another important problem interesting for the fundamental and practical needs of optics. The high-order harmonics generation (HHG) of ultrashort laser pulses in isotropic media (gases and preformed laser plasma) is the simplest and most reliable method of changing the frequency of exciting pulses in the XUV direction. Methods of HHG enhancement include optimization of various parameters, such as particle density and excitation level, the intensity of exciting pulses, fluence of HP, etc, to create preferred conditions of this process, when phase mismatch does not play a decisive role in limiting the HHG conversion efficiency. Various metals, metal alloys, insulators and semiconductors were analyzed by ablation and HHG in laser-induced plasmas (LIP). Further optimization of these processes involves the methods not applicable in the case of HHG with the use of gas jets. LIPs can naturally include relatively large aggregates (clusters, quantum dots and nanoparticles). The resonance amplification of single harmonic and the formation of specific conditions of modulated LIP, when quasi-phase matching is achieved for different groups of harmonics, can be used for enhancing single harmonic signal in a preselected spectral region. These methods are difficult to implement in a single experiment since the requirements for these methods can contradict each other. Therefore, the search for new schemes, materials, methods and approaches is of paramount importance for the improvement of HHG. Practically the coherent light sources in the XUV spectral range can facilitate

the optical visualization of nanoscale and subcellular systems, allow the improvement of optical lithography and monitoring of the movement of electrons in atoms, molecules, and nanostructured systems in real-time. In addition, such radiation sources may contribute to creating a new analytical approach - resonance spectroscopy in XUV.

**International context of the research.** Numerous leading universities and research centers worldwide are performing research in the field of strong-field phenomena, particularly ionization, HHG and application of coherent XUV to study ultrafast electron dynamics in atoms, molecules and materials with attosecond time scale. Among them are the group of HHG spectroscopy at Imperial College (London, England), HHG and EUV science group at the Advanced Research Center for Nanolithography (Amsterdam, Netherlands), the Ultrafast Dynamics department at Max-Planck Institute for Multidisciplinary Sciences (Gettingen, Germany), group of Nanostructures and Ultrafast X-Ray science at ETH-Zurich (Zurich, Switzerland), group of Nonlinear Optics at Changchun Institute of Optics, Physics and Fine Mechanics (Changchun, China), group of Common Research Facility at American University of Sharjah (Sharjah, UAE), group of the Center of Nanotechnology at University of Munster (Munster, Germany), group of Nonlinear Optics at the University of Tokyo (Tokyo, Japan), group of the Laser Plasma Division at the Center of Advanced Technologies (Indore, India), a group at the National Institute of the Science (Montreal, Canada) and other.

**Current state of the research on the topic.**

Coherent short-wavelength radiation is becoming increasingly important for a wide range of fundamental and applied research in various fields of science and technology. Monochromatic and coherent light pulses in XUV spectral range with the femtosecond and attosecond duration will further increase the resolution of optical lithography, facilitate the optical visualization of nanoscale and subcellular systems, as well as allow monitoring the movement of electrons in atoms, molecules, and nanostructured systems in real time

The most effective approach for generating coherent radiation in the XUV region is HHG using ultrashort laser pulses. Notice that the most commonly used method since the late eighties till now is the HHG in gases [M. Ferray et al, "Multiple-harmonic conversion of 1064 nm radiation in rare gases," J. Phys. B 21, L31–L36 (1988)]. Meanwhile, the use of relativistic HHG, HHG in gases, and HHG during propagation through the solids is limited by the relatively low efficiency of converting the main wave into higher harmonics (i.e., into harmonics exceeding the thirtieth orders of commonly used near-infrared lasers; respectively, less than  $10^{-5}$  and less than  $10^{-6}$  for HHG in gases and from surfaces), which, despite considerable efforts and financial costs, apparently have not significantly improved over the past thirty years. The fourth

method is the use of LIP for HHG, which began its development in the nineties of the last century.

When a high-intensity laser pulse passes through a gaseous or plasma medium, its atoms and ions emit odd harmonics. For a laser radiation wavelength  $\lambda$ , a superposition of the components  $\lambda, \lambda/3, \lambda/5, \lambda/7$ , etc. is observed at the output of the nonlinear medium. The harmonics of laser radiation result from a three-stage process that comprises the ionization of an atom (or ion), the electron acceleration in the electromagnetic field, and the subsequent recombination with the ion and emission of harmonics. This process is periodically repeated every half cycle of the electromagnetic wave. The highest-order harmonics are due to the electron acceleration at the instant of ionization at the peak intensity of the laser pulse.

A characteristic feature of the three-stage HHG is a rapid decrease in the intensity of first (low-order) harmonics followed by a long plateau where the intensities of high-order harmonics differ only slightly from one another, and an abrupt decrease in the intensity of the highest-order harmonics generated (the so-called harmonic cutoff  $H_c$ ). The position of  $H_c$  is determined by the ionization potential  $I_i$  of the particles participating in harmonic generation (of atoms in the case of HHG in gases and of ions in the case of HHG in plasma) and by the ponderomotive potential, which defines the accelerated electron energy and depends on the intensity of femtosecond radiation and its wavelength. The main HHG properties may be characterized using the semiclassical model [J. L. Krause et al, "High-order harmonic generation from atoms and ions in the high intensity regime," *Phys. Rev. Lett.* 68, 3535-3537 (1992). P. B. Corkum, "Plasma perspective on strong-field multiphoton ionization," *Phys. Rev. Lett.* 71, 1994-1997 (1993). M. Lewenstein et al, "Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields," *Phys. Rev. A* 49, 2117-2125 (1994)], although a more accurate description calls for a consistent quantum mechanical treatment.

Along with the microscopic consideration of the processes occurring in the interaction of high-power ultrashort laser pulses with atoms and ions, account should also be taken of macroscopic processes such as the effect of transmission through a medium and group effects. These effects primarily include dephasing, absorption, and defocusing, which were analyzed in [D. B. Milošević, "Theoretical analysis of high-order harmonic generation from a coherent superposition of states," *J. Opt. Soc. Am. B* 23, 308-317 (2006)].

The introduction of new advanced theoretical and experimental methods in plasma spectroscopy using the high-order harmonics generation approach (for example, using filaments, radiation sources in the mid-infrared region, external two-color pumping, solid-state nanostructures, clusters, and quantum dots with high values of lower-order optical nonlinearities, etc.), along with previously developed methods will allow a deeper understanding of the physical and optical properties of materials

through the interaction of the laser with ablated samples. This knowledge is also extremely important for further improving the conversion efficiency of HHG and formation of the effective sources of coherent XUV for practical needs.

From the point of view of the variety of topics implemented during the development of this approach, HHG in plasma can be considered as a multi-panel problem, including the interaction of laser with the matter, atomic spectroscopy, the synthesis and application of nanomaterials, laser physics, low-density plasma studies, quantum and nonlinear optics. As follows from the objectives of this approach, it is aimed at studying materials due to the synergy of the above areas. The subjects of these studies are almost all non-radioactive solid materials of the periodic table. Note that the commonly used HHG in gases is limited to a few, usually noble, gases. Additionally, HHG conversion efficiency in LIPs can be, in the case of some ablating targets, larger than the one in gases. The potential of HHG spectroscopy in ablated materials suggests its application to thousands of solids (metals, metalloids, semiconductors, dielectrics, complex structures like large organic molecules, alloys, nanostructured species, such as clusters, quantum dots, nanoparticles, thin films, etc.). Thus, this HHG method significantly expands the fields of materials research using new approaches. To facilitate this process, the development of various theoretical approaches is required.

The use of the plasma formed during laser ablation of solids as a medium for HHG is a very attractive and promising approach since it leads to the realization of advantages that allow the analysis of plasma components in various ways. Plasma media provide various possibilities for creating effective coherent sources in the XUV region using HHG when the femtosecond pulses pass through them. The use of extended LIPs, resonances in atomic or ionic systems, clusters, quantum dots, and nanoparticles in plasma formations, two- and three-color pumping of LIPs, creation of optimal conditions for energy transfer in spatially modulated plasma structures, and other technical and fundamental advantages of this HHG approach allow us to expect high conversion efficiency to XUV (up to  $\sim 10^{-4}$  for the 20 eV photons [R. A. Ganeev et al, "Strong resonance enhancement of a single harmonic generated in extreme ultraviolet range," *Opt. Lett.* 31, 1699-1701 (2006)]), which can lead to the practical applications of such coherent radiation sources. Similar to HHG in gases, harmonics from plasma plumes can have unique temporal characteristics in the attosecond time domain, which makes it possible to simultaneously generate ultrashort pulses and diagnose various processes related to harmonic emitters [R. A. Ganeev, *High-Order Harmonics Generation in Plasmas: Resonance Processes, Quasi-Phase-Matching, and Nanostructures*, 270 pages, Springer (2022)]. Thus, further steps in this direction require a detailed theoretical consideration of different mechanisms influencing the process of HHG in LIPs.

**Connection of the research topic with the research activities of the institution.** Experimental results for Ph.D. research were obtained in the research facilities of Changchun Institute of Optics, Physics and Fine Mechanics (China) and Common Research Facility at American University of Sharjah (UAE). Theoretical calculations and modeling simulations were performed at Changchun Institute of Optics, Physics and Fine Mechanics (China), American University of Sharjah (UAE), University of Latvia (Latvia) and in cooperation with simulations groups of various universities in Germany, Japan, and Russia.

**The aim of the research work is** the both theoretical and experimental study of the strong-field ionization and high-order harmonics generation in laser-induced plasmas and gases using ultrashort laser pulses. The theoretical and experimental analysis of high-order harmonics generation using single- and two-color pumps of laser-induced plasmas to achieve the resonant-enhanced and quasi-phase-matching-enhanced (QPM) harmonics emission.

**The tasks of the research are:**

Study of strong field ionization dynamics in molecules and on the surface of nanoparticles under irradiance by short and ultrashort laser pulses;

Investigation of high-order nonlinear properties of gases and various laser-induced plasmas;

Study of resonance-enhanced HHG and processes of spectral tuning with the application of multijet plasmas;

Understanding of the mechanism of HHG with two-color pumping schemas and with the utilization of chirped laser pulses;

Application of nanoparticles enriched laser-induced plumes for HHG.

**The object of the research** is the laser-induced plasmas from simple metal and complex molecular targets, nanoparticles-containing plasmas and gas jets.

**The subject of the research** is the properties and characteristics of time-of-flight spectra, high-order nonlinear optical properties of the target's materials, and spectral characteristics of generated high-order harmonics.

**Methods of the research** include both theoretical and experimental. Theoretical methods include simulation with analytical models derived in the frame of strong-field approximation and numerical integration of time dependent Schrodinger equations. Experimental methods include probing gas jets or forming by heating laser pulse laser-induced plasmas with short and ultrashort probing pulses, in conditions of high vacuum. Ion yields and momentum spectroscopy are collected using an extended time-of-flight technique, known as reaction nanoscopy. HHG emission is registered using XUV spectroscopy method.

**The scientific novelty of the research**

It was demonstrated that proton momenta obtained by reaction nanoscopy are characteristic of single nanoparticles and their clusters in an aerosol stream. It was demonstrated *for the first time* that cluster signals dominate over single nanoparticle signals at low intensities, offering a suitable explanation for discrepancies between previous experimental data on the electron emission cutoff from silica nanoparticles.

*For the first time* were presented results that unravel complex and unique molecular dynamics carried by water/heavy water molecules adsorbed on the surfaces of SiO<sub>2</sub> nanoparticles to form H<sub>3</sub><sup>+</sup>/D<sub>3</sub><sup>+</sup> ions. Results offer an unambiguous demonstration of a characteristic of nanoparticles as catalysts for exotic chemical reactions in intense femtosecond laser fields.

*For the first time* were performed the detailed strong-field approximation (SFA) calculations of HHG spectra for Li, Li<sup>+</sup> LIPs, a good agreement with experimental results was found and proper conclusions about the role of Li<sup>+</sup> ions, possessing the highest second ionization energy, in HHG cutoff extension were reported.

It was demonstrated *for the first time* for the aluminum Al LIPs that the presence of strong ionic emission lines in the XUV range does not affect the yield of single nearby harmonics. A 5-fold growth of harmonic yield was demonstrated in the case of Al nanoparticle (NP) plasma. SFA calculations were presented and it was demonstrated that cutoff is attributed to the involvement of Al neutral atoms rather than Al<sup>+</sup>.

Generalization of the Gaussian exact model (GEX) for description of HHG was formulated which allowed a fully analytical representation of SFA HHG for molecules, without using Saddle-point technique. The explicit influence of the highest occupied molecular orbital (HOMO) symmetry on peculiarities of HHG spectra, including the polarization properties of harmonics around the minima region was demonstrated in the case of H<sub>2</sub> and H<sub>2</sub><sup>+</sup> molecules.

The variations of the Cooper minimum (CM) in the HHG spectra generated during the interaction of Ar gas with 1030 nm, 35 fs laser pulses and with applying orthogonally-polarized fields of the fundamental radiation and its second harmonic are demonstrated.

The enhancement of harmonics in the vicinity of 32 nm during HHG in the Mo LIP was analyzed both numerically and experimentally.

The comparison of resonance enhancement and quasi-phase-matching together with the combination of both processes are presented and investigated theoretically and experimentally.

*For the first time* the study in carbide-containing LIPs, with SiC, B<sub>4</sub>C, and Cr<sub>3</sub>C<sub>2</sub> nanoparticles, as media for high-order harmonics generation during single-color pump and orthogonal polarized two-color pump with chirped and chirp-free pulses are presented. Theoretical SFA calculations demonstrated the role of the polarization orientations pumping fields.

**Practical results of the work.** Results of the theoretical and experimental analysis were used during the design improvement of HHG facility at American University of Sharjah (UAE). Various codes for HHG calculations and experimental data processing were developed and are now actively applied within the research groups at Changchun Institute of Optics, Physics and Fine Mechanics (China), American University of Sharjah (UAE) and the laboratory of Nonlinear Optics at University of Latvia (Latvia).

**The reliability of the research results** is supported by the fact that they were obtained using modern calculation and experimental techniques. The reliability of the results is also based on the compatibility of obtained results with the experimental data. Moreover, to further underline the reliability of obtained results, all articles of the Ph.D. work were peer-reviewed by the experts in the field of nonlinear optics and published in the highly-ranked journals attributed to the Q1 and Q2 quartiles.

**Significance of research results.** Theoretical and experimental results of the research devoted to studying strong-field ionization phenomena contribute to the development of photocatalysis and the surface photochemistry of nanoparticles, which open routes to exotic molecular entities to be produced via non-traditional ways. The results of research devoted to HHG contribute to a better understanding of high-order nonlinear optical processes and practical help in developing coherent light sources in the XUV spectral range. This work is important for the optical visualization of nanoscale and subcellular systems, optical lithography and monitoring of the movement of electrons in atoms, molecules, and nanostructured systems in attosecond scale of time.

#### **Implementation of the research results.**

The obtained results of the study were used in more than 50 scientific articles, in particular - studies of the control of the Cooper minimum in the HHG spectra were used 4 times (T.-F. Jiang, *J. Phys. B* 55, 075601; G.S. Boltaev, M. Iqbal, N.A. Abbasi et al., *Sci. Rep.* 11, 5534; K. M. Dorney, T. Fan, Q. L. D. Nguyen et al., *Optics Express* 29, 38119; R. Rajpoot, A. R. Holkundkar, J. N. Bandyopadhyay, *J. Phys. B* 53, 205404), abnormal formation of  $H_3^+$  cations on the surface of nanoparticles 5 times (J. Wang, Q. Qu, F. Sun, et al, *Optics Express*, 31, 9678; V. Yalyshev, G. Boltaev, M Iqbal et al, *ACS Omega* 7, 28182; H. Li, X. Gong, H. Ni, *Journal of Physical Chemistry Letters* 13, 5881 et al.), resonant HHG in plasma of molybdenum – 8 times (M. Venkatesh, V.V. Kim, G.S. Boltaev, et al., *International Journal of Molecular Sciences* 24, 6540; W. Fu, YH Lai, W. Li, *Optics Express* 30, 47315, etc.), ionization suppression results in molecular gases are found 15 times (J.E. Szekely, T. Seideman, *Physical Letters of Review*, 129, 183201; M.K. Stroe, M. Fidirig, *Optik*, 224, 165612; Y. Chen, B. Zhang, *J. Phys. B* 45, 215601 et al.), comparison study of HHG in Ar and various LIPs was used 9 times (R.A. Ganeev, *Applied Physics B* 129, 17; V.V. Kim,

I.A. Shuklov, A.A. Mardini et al., *Nanomaterials* 12, 1264; D. Goldberger, D. Schmidt, J. Barolak, *Optics Express*, 29, 32474, etc) and etc.

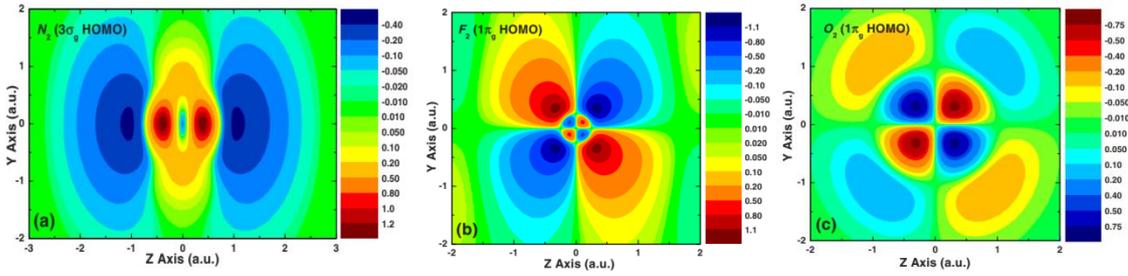
**Publication of the research results.** The results of the Ph.D. research are presented in 15 peer-reviewed articles published in prestigious Q1/Q2 quartile scientific journals recommended by the Supreme Attestation Commission of the Republic of Uzbekistan for publication of the main scientific results of Ph.D. thesis and displayed in the *Web of Science* scientific database.

## MAIN CONTENT OF THE WORK

**Introduction.** The results covered here are published by PhD candidate and his coauthors in 10 scientific articles from Q1/Q2 quartiles of scientific journals. Most theoretical calculations and experimental data for these publications were collected during the 5 years period of work in scientific institutes and universities of Uzbekistan, People Republic of China, United Arab Emirates and Latvia. The topics of publications cover the main strong-field phenomena such as strong-field ionization and high-order harmonics generation (HHG). Ionization and HHG were studied in different media, such as atomic noble (Ar, Xe), molecular gases ( $N_2$ ,  $H_2$ ,  $F_2$ ,  $O_2$ , etc) and laser-induced plasmas (LIPs) produced on the surfaces of solid targets with various molecular and structural content (metals, metal carbides, nanoparticle-containing materials). The parameters of a main probing tool, ultrashort femtosecond laser pulses, such as pulse energies, durations, presence and amount of chirp, were tuned, together with the application of the two-color pump configurations. In this section the theoretical and experimental studies of ionization suppression phenomena from simple diatomic molecules [Phys. Rev. A 79, 023415 (2009)], ionization on the surfaces of nanoparticles and clusters [ACS Photonics 7, 1885-1892 (2020)], formation of  $H_3^+$  ions [Nat Commun 12, 3839 (2021)]; HHG from simple metals LIPs (Li and Al) [Opt. Lett. 44, 3693-3696 (2019); J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 245601 (2019)], HHG in diatomic gases  $H_2$ ,  $H_2^+$  [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 155405 (2020)], interference process during HHG [New J. Phys. 22, 083031 (2020)], resonant-induced effects of harmonics enhancement [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 195401 (2020)], quasi-phase matching of harmonics [Opt. Continuum 1, 1098-1116 (2022)] and HHG in the LIPs containing nanoparticles [Nanomaterials 12, 4228 (2022)] are presented.

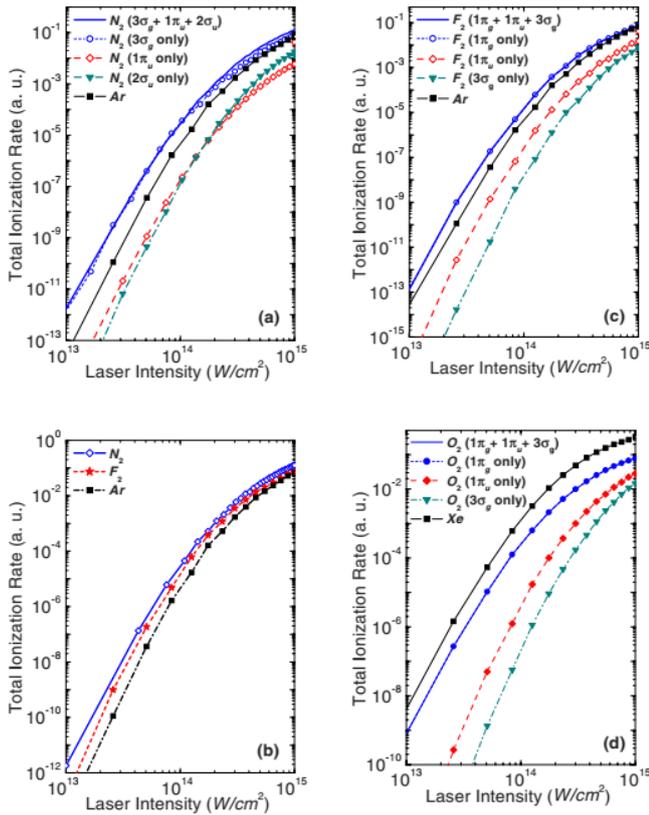
**Part 1. Strong-field ionization in homonuclear diatomic molecules, reaction nanoscopy technique on the surface of nanoparticles.** In this section, the results of both theoretical and experimental studies of ionization processes under irradiation with ultrashort femtosecond pulses are presented. First work [Phys. Rev. A 79, 023415 (2009)] is devoted to theoretical consideration of the puzzling phenomenon of no suppression observed in experiments on strong-field ionization of laser irradiated diatomic  $F_2$  molecules as compared to its atomic counterpart Ar of nearly equal ionization potential, while the clear signs of laser field-induced intramolecular interference effects due to the two-centered nature of molecular wave function became manifested by a somewhat enhanced e.g., for  $N_2$  versus Ar and/or highly suppressed e.g., for  $O_2$  versus Xe ionization observed for laser-irradiated diatomic molecules compared to their “companion” or counterpart atomic species of nearly identical binding energies. In the presented work velocity-gauge formulation of molecular strong-field approximation (VG SFA) was used for calculations. One of the reasons for

developing an approach based on an alternative formulation of SFA was an inability to receive an appropriate interpretation within the developed strong-field molecular orbital Ammosov-Delone-Krainov (MO-ADK) theory, which also resulted in a high suppression for ionization of  $F_2$  and  $O_2$  in terms of the so-called ADK model of tunneling ionization. The approach essentially exploits the density-functional-theory DFT method applied for the numerical composition of initial laser-free molecular states using the modified van Leuwen–Baerends LB-intramolecular binding potential, which incorporates both the exchange and correlation local-spin-density approximation LSDA potentials and also allows the construction of initial laser-free wave function correctly reproducing molecular and/or atomic valence shells and respective binding energies. The information about the specified properties of the laser-exposed system under single active electron (SAE) based consideration is contained in the form of the ionization potential and Fourier transform of the initial laser-free wave function of the  $n^{\text{th}}$  discrete state. In the case of laser-irradiated homonuclear diatomic molecules  $F_2$ ,  $N_2$ , and  $O_2$  and their atomic counterparts Ar and Xe initial discrete states were approximated by a set of valence shells of well-separated discrete binding energies and respective wave functions, which were composed numerically using the standard routines of the quantum chemistry GAUSSIAN-03 software. In particular, the initial laser-free total molecular and/or atomic wave function is presently composed using a standard Gaussian basis set (GTO) and modified employing admixing the orbitals of sp-type and DFT calculation method applied along with the LB- model intramolecular binding potential. The HOMO corresponding to molecular wave functions numerically composed for  $N_2$ ,  $O_2$ , and  $F_2$  and resulting in accurate values of molecular binding energies are presented in Fig. 1 in momentum space. In particular, on the calculated  $3\sigma_g$  HOMO in  $N_2$  Fig. 1a is well seen the electron momentum distribution lined up along the internuclear axis and consists of three well-separated regions noticeably extended along the spatial direction perpendicular to the internuclear axis. Results of VG SFA calculation, as an illustration of the relevance of the applied DFT-based numerical composition of molecular valence shells in homonuclear diatomics, are displayed in Fig. 2 for instant molecular ionization rates depending on the incident laser field intensity. In particular, Fig. 2 demonstrates no suppression in the ionization of  $N_2$  as compared to  $F_2$  and Ar, as well as no suppression in the ionization of  $F_2$  as compared to Ar.



**Fig. 1.** [Fig. 2 in Phys. Rev. A 79, 023415 (2009)] The contour maps planar cuts of molecular wave functions  $\Phi(\mathbf{p}, \mathbf{R}_0)$  in momentum space the Fourier transform of the respective molecular wave functions calculated for the HOMO in homonuclear diatomics:  $3\sigma_g$  in  $N_2$  panel 1a,  $1\pi_g$  in  $F_2$  panel 2b, and  $1\pi_g$  in  $O_2$  panel 2c. The internuclear molecular axis is supposed to be lined up in a horizontal direction.

Thus, according to the presented DFT SFA consideration,  $F_2$  proved to be more likely ionized than Ar, in good accordance with experimental data, although in contradiction with the respective results of the earlier alternative strong-field considerations all predicting a high suppression in the ionization of  $F_2$  versus Ar. In the meantime, Fig. 2b suggests a high suppression in the ionization of  $O_2$  versus Xe, which is also well consistent with relevant experiments. Moreover, results in Fig. 2 also all suggest that the ionization of either of the diatomics under consideration is always dominated by the contribution from the ionization of their HOMO, so the respective contribution from inner molecular shells will always be considerably smaller. It is also interesting to note that within a whole laser intensity domain under consideration the relative contribution from the ionization of the inner  $3\sigma_g$  shell in  $O_2$  and  $F_2$  remains noticeably suppressed even as compared to that from the ionization of the inner  $1\pi_u$  shell. In conclusion for results of [Phys. Rev. A 79, 023415 (2009)], the process of strong-field ionization in the laser irradiated diatomic molecule  $F_2$  compared to other homonuclear diatomics  $N_2$  and  $O_2$  and their counterpart atoms Ar and Xe, respectively was considered theoretically and studied numerically within the framework of the velocity gauge VG version of conventional strong-field approximation SFA and adequately described the phenomenon of no suppression in the  $F_2$  ionization versus  $N_2$  and Ar. More specifically, the currently applied VG SFA approach is essentially based on an incorporated alternative and more accurate DFT method of numerical composition of initial laser-free molecular and/or atomic state under ionization. Moreover, elaborated numerical methods were partially used and extended in the subsequent works [Opt. Lett. 44, 3693-3696 (2019); J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 245601 (2019); J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 155405 (2020); Nanomaterials 12, 4228. (2022)] for theoretical calculations of high-order harmonics generation in various media.

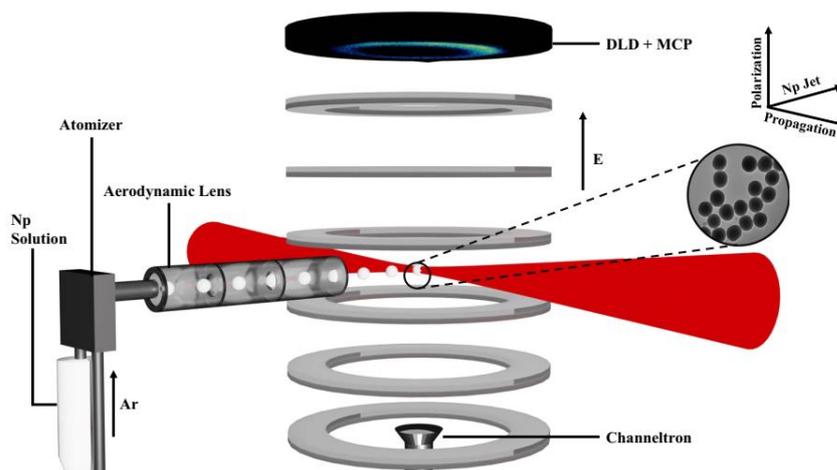


**Fig. 2.** [Fig. 3 in Phys. Rev. A 79, 023415 (2009)] The molecular ionization rates for laser-irradiated diatomics N<sub>2</sub> panels 3a and 3b, F<sub>2</sub> panels 3b and 3c, and O<sub>2</sub> panel 3d plotted versus the intensity of Ti:sapphire laser radiation assuming that the internuclear molecular axis is aligned along the laser field polarization. For each of the diatomics the total ionization rate thick solid line corresponding to the overall contribution from the HOMO and inner molecular valence shells (i.e., 1 $\pi_u$  and 2 $\sigma_u$  in N<sub>2</sub> or 1 $\pi_u$  and 3 $\sigma_g$  in F<sub>2</sub> and O<sub>2</sub>) is presented as well as the respective partial ionization rates thin lines corresponding to a separate contribution from a single outermost or inner molecular valence shell under consideration. The calculated atomic ionization rates produced due to the ionization of the respective atomic counterpart are presented by filled squares.

The next two presented works in this section [ACS Photonics 7, 1885-1892 (2020) and Nat Commun 12, 3839 (2021)] are presenting experimental and theoretical results of the sophisticated reaction nanoscopy technique, what represent a further evolution of time-of-flight (TOF) techniques, enabling registration of momentum map distributions for both ion and electron products of interaction of ultrashort femtosecond pulses with targets. Fig. 3 shows experimental arrangement for reaction nanoscopy, by mean of the aerodynamic lens aerosol jet containing nanoparticles are formed. By joining with a novel high-power fiber-based laser amplifier femtosecond system (AFS-UFFL-300-2000-1030- 300 from Active Fiber Systems GmbH) at the American University of Sharjah (AUS) with a central wavelength of 1030 nm and repetition rate of 150 kHz with pulse duration of 40 fs makes world-unique combination for study of ultrafast processes.

The interaction of laser light with these nanoparticles facilitates local field enhancement and nanofocusing. Through interactions with intense laser pulses, control over light-induced electron emission and acceleration on subwavelength spatial and attosecond temporal scales can be achieved. At moderate intensities ( $\sim 10^{14}$  Wcm<sup>-2</sup>), a variety of effects have been discovered that contribute to electron acceleration. These include elastic electron backscattering in near-fields as well as local and nonlocal charge interactions. At higher intensities, laser acceleration of ions and plasma dynamics can be investigated with aerosolized nanoparticles. Based on a point-

projection mapping concept, for sufficiently low intensities without plasma formation, reaction nanoscopy has opened the door to the investigation of femtosecond laser-induced photochemical processes on the surface of aerosolized nanostructures with high spatial resolution. It was shown that relative reaction yields of deprotonation reactions on single spherical nanoparticles can be mapped with nanometer precision at the surface.



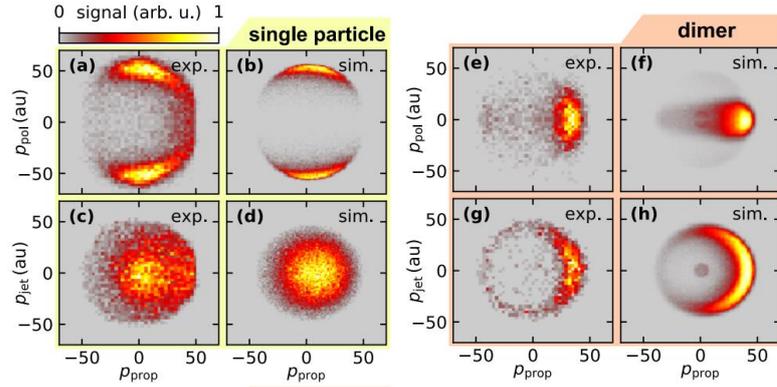
**Fig. 3.** [Fig. 5 in Nat Commun 12, 3839 (2021)] Reaction nanoscopy. Illustration of the experimental setup showing the nanoparticle solution (Np Solution) that is aerosolized by an atomizer with the help of Ar as carrier gas. The aerosol is then collimated using the aerodynamic lens producing a jet that is admitted to the ultrahigh vacuum chamber. The nanoparticles interact with the laser field in the center of a constant-field (E) spectrometer. The ions generated from the interaction are accelerated towards a microchannel plate (MCP) and delay-line detector (DLD). The electrons are accelerated towards a channeltron and are used to discriminate between nanoparticles and background ions. The inset shows a scanning electron microscope (SEM) image of the silica nanoparticles (NanoComposix) used in the experiments.

Nanoparticles are often prepared as colloidal suspensions in suitable solvents. The tendency of the particles to aggregate in the solution depends on a variety of factors and can be controlled. Furthermore, in the evaporation step, droplets can contain several single particles that can result in cluster formation. It is common for aerosol sources to generate a beam of single particles and their clusters. In the work [ACS Photonics 7, 1885-1892 (2020)], the point-projection mapping of near-fields to the angular distribution of laser-generated ions is exploited to accomplish an in situ discrimination between reaction yields from single particles and their clusters. While the single nanoparticle exhibits a rather dipolar field distribution, the field pattern around the dimer is more complex, larger in magnitude and strongly orientation-dependent. These differences in the near-fields significantly affect nonlinear processes such as strong-field ionization of the nanoparticle surface and the bond breaking of molecules attached to the surface. Using reaction nanoscopy, proton emission was

investigated from molecular dissociation on the surface of silica nanoparticles, concluding that distinct differences in the proton momenta allow discrimination between reaction yields from single nanoparticles and their clusters. Because of this sensitivity to the precise shape of the enhanced near-field, reaction nanoscopy can be considered, collaterally, as an *in-situ* particle characterization technique.

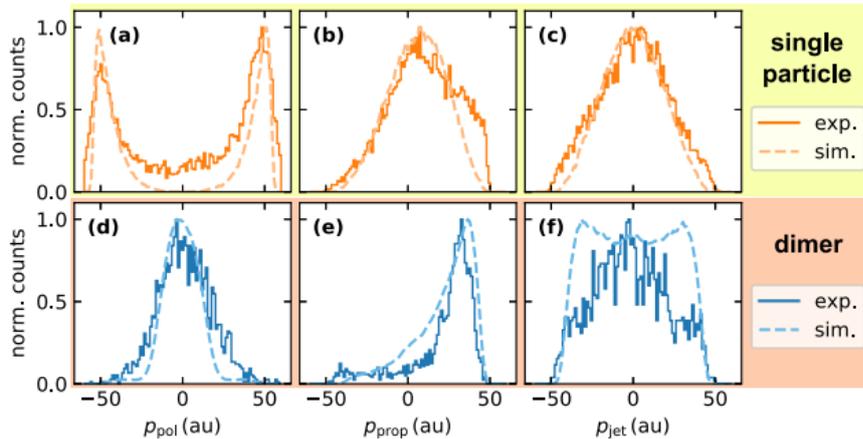
The near-field distribution around silica spheres with a diameter of 300 nm and their dimers is obtained from FDTD simulations (Lumerical 2020a, FDTD Solver version 8.23.2194) on a regular grid with 5 nm spacing. The probability distribution for the generation of static, positive charges on the surfaces is calculated from an ADK-type quasi-static ionization rate for a Gaussian laser pulse with 40 fs FWHM of the temporal intensity envelope. An ionization potential for silica nanoparticles of 10.2 eV was used in the simulations. The distribution of protons near the surface is assumed to be the product of a radial Gaussian distribution ( $r_0 = 150$  nm,  $\sigma_r = 30$  nm) and a power law ( $I^{13}$ ). The Gaussian distribution models the spatial distribution of molecules near the nanoparticle surface, while the power law accounts for the intensity dependence of proton generation, adapted here for a wavelength of 1030 nm. The initial positions of protons are sampled from the corresponding probability distribution and then classically propagated in the static field of a sample of positive point-charges drawn from the surface-charge distribution. Trajectories inside a nanoparticle are neglected. Multiple sets of sampled charges are simulated to ensure convergence of the final momentum distribution. With the power law for proton generation, it is implicitly assumed that the intensity is far below the saturation regime for proton generation, which is ensured experimentally by a proton rate of less than one generated proton per laser shot. The effect of focal-volume averaging can be neglected, as in the nonsaturated regime the proton yield very strongly scales with intensity. For the orientation averaged results for dimers, about 600 random dimer orientations were used. For faster convergence, the sampling density for different alignment angles  $\theta$  was adapted to the expected proton yield. The final proton momentum spectra were obtained by a weighted sum of the results for the individual orientations.

A comparison of experiment and simulation for nanoparticles and dimers is shown in Fig. 4. The projection of the 3D momentum distribution onto the polarization-propagation plane, displayed in Fig. 4b, shows near-quantitative agreement with the experimental result (comp. Fig. 4a). The experimental and theoretical results for the projected momenta onto the plane normal to the polarization (Fig. 4c,d) agree to a similar extent.



**Fig. 4.** [Fig. 5 in ACS Photonics 7, 1885-1892 (2020)] Comparison of experiment and simulation for nanoparticles and dimers. (a, c) Measured momentum distributions of protons from isolated nanoparticles at a peak intensity of  $5 \times 10^{13} \text{ Wcm}^{-2}$  and a sample concentration of 0.2 g/L. Here,  $\rho_{\text{prop}}$  is laser propagation direction,  $\rho_{\text{pol}}$  is the laser polarization direction, and  $p_{\text{jet}}$  is the momentum component along the nanoparticle jet. (b, d) Corresponding model simulations for single nanospheres. (e, g) Experimental data for dimers at a lower peak intensity of  $1.85 \times 10^{13} \text{ Wcm}^{-2}$  and a sample concentration of 1.5 g/L. (f) and (h) display the corresponding model simulations for nanosphere dimers

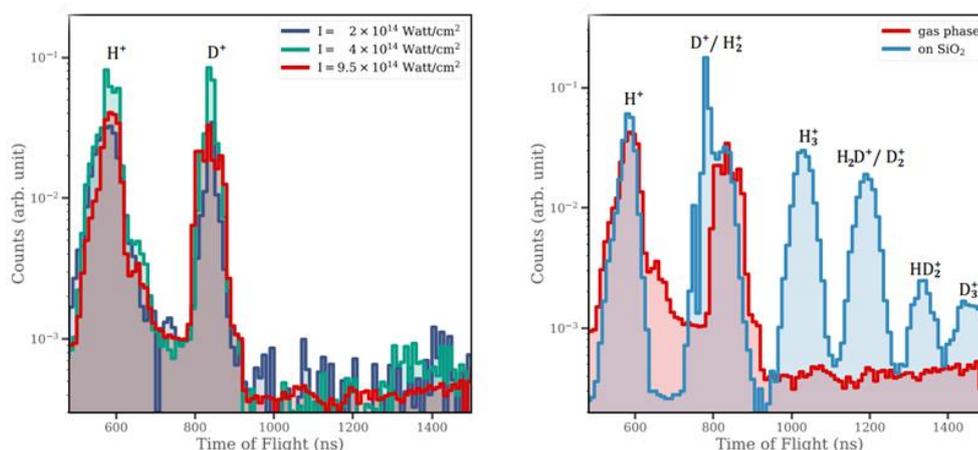
For a better demonstration of the quantitative agreement between theory and experiment, Figs. 5a-c show one-dimensional projections of the momentum distributions onto all three axes. Apart from minor discrepancies at small values of  $|\rho_{\text{pol}}|$  (Fig. 5a) and large values of  $\rho_{\text{prop}}$ , the shape of all three measured distributions is well reproduced by the model.



**Fig. 5.** [Fig. 6 in ACS Photonics 7, 1885-1892 (2020)] Projected proton momentum distributions for single nanoparticles and dimers. The projected distributions are obtained from the data in Fig. 4. The results for single particles are displayed in the first row (a)-(c). The results for dimers are depicted in the second row (d)-(f). The first column (a), (d) shows the momentum component along the laser polarization  $\rho_{\text{pol}}$ , the second column (b), (e) the component along the laser propagation axis  $\rho_{\text{prop}}$ , and the third column (c), (f) shows the component along the nanoparticle jet  $p_{\text{jet}}$

In the [Nat Commun 12, 3839 (2021)] are presented results that unravel complex and unique molecular dynamics carried by water/heavy water molecules adsorbed on the surfaces of SiO<sub>2</sub> nanoparticles to form H<sub>3</sub><sup>+</sup>/D<sub>3</sub><sup>+</sup> ions. This bimolecular photochemical reaction, which involves proton/deuteron migration as well as bond cleavage and bond formation, is shown to lead to the formation of H<sub>3</sub><sup>+</sup>/D<sub>3</sub><sup>+</sup> from two water/heavy water molecules. Results offer an unambiguous demonstration of yet another characteristic of nanoparticles as catalysts for exotic chemical reactions in intense femtosecond laser fields. The same experimental arrangement as in [ACS Photonics 7, 1885-1892 (2020)] is used. To investigate the formation of H<sub>3</sub><sup>+</sup>/D<sub>3</sub><sup>+</sup> from water/heavy water molecules adsorbed on the surface of silica nanoparticles, a series of experiments on SiO<sub>2</sub> nanoparticles (300 and 100 nm diameters) were conducted, which were suspended in deionized H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O, before their injection into the vacuum chamber. The silica nanoparticles were exposed to laser intensities that are well below the intensities where metallization is expected to occur and, therefore, the effects of plasmon excitations can be neglected. To ensure the accuracy of experimental results, by Fourier-transform infrared (FTIR) spectroscopy was confirmed, that nanoparticles possessed a pure surface, devoid of any hydrocarbons; the surface exclusively comprised silanols. The absence of hydrocarbons from the surfaces of nanoparticles is essential for our experiments, as it allows to precisely and unambiguously identify the source of the emitted trihydrogen and trideuterium ions. Fig. 6 shows a comparison between the TOF spectra of 100 nm silica nanoparticles suspended in D<sub>2</sub>O and H<sub>2</sub>O. The observation of D<sub>3</sub><sup>+</sup> when D<sub>2</sub>O is used as a suspension solution is unequivocal evidence in support of the formation from water adsorbed on the nanoparticle surface. Moreover, the existence of HD<sub>2</sub><sup>+</sup> in the TOF spectrum provides further confirmation, as it can only be produced when a D<sub>2</sub> moiety is formed through a migration mechanism in a single D<sub>2</sub>O molecule followed by the abstraction of a proton from a neighboring silanol ion. The TOF spectra in Fig. 6 reveal a considerable difference in yield between H<sub>3</sub><sup>+</sup> and D<sub>3</sub><sup>+</sup> emitted from the surfaces of nanospheres inhabited by H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O, respectively. The relative yield of the trihydrogen ion, which is calculated as the ratio of the area under the H<sub>3</sub><sup>+</sup> peak to the sum of areas under H<sup>+</sup>, H<sub>2</sub><sup>+</sup>, and H<sub>3</sub><sup>+</sup> peaks, was found to be 5.4% when produced from nanoparticle surfaces inhabited by H<sub>2</sub>O. In the case of D<sub>2</sub>O, we found the relative yield of D<sub>3</sub><sup>+</sup> emitted from D<sub>2</sub>O molecules on the surface of silica nanoparticles to be ~0.38%. We have also measured the relative yield of HD<sub>2</sub><sup>+</sup> to be ~0.54%. Thus, the sum of the yields of D<sub>3</sub><sup>+</sup> and HD<sub>2</sub><sup>+</sup> remains less than that of H<sub>3</sub><sup>+</sup> emitted from the surface of silica nanospheres inhabited by H<sub>2</sub>O. As isotopologs, H<sub>2</sub>O and D<sub>2</sub>O have nearly identical values of ionization energy and a very similar intensity requirement to initiate the hydrogen migration process as well. It is therefore expected that the relative yields of H<sub>3</sub><sup>+</sup> and D<sub>3</sub><sup>+</sup> will be similar. However, the difference in the yields between H<sub>3</sub><sup>+</sup> and D<sub>3</sub><sup>+</sup>

suggests tantalizing possibilities of the existence of multiple novel pathways to form the trihydrogen cation as follows: (i) the production of  $H_3^+$  exclusively from water adsorbed on the surface (ii) or solely from silanol, (iii) a hybrid process involving silanol and water where  $H_2$  is formed from silanol, followed by acquisition of a proton from water, and (iv) a hybrid process where the  $H_2$  is generated from water, which then abstracts a proton from silanol.



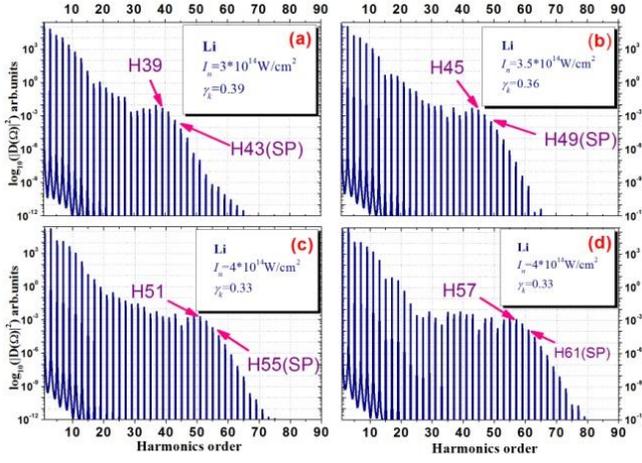
**Fig. 6.** [Fig. 2 in Nat Commun 12, 3839 (2021)] Ion emission from  $D_2O$  in gas phase and on nanoparticles. (Left panel) Comparison between time-of-flight spectra for  $D_2O$  in the gas phase for different laser intensities as indicated. The observed  $H^+$  ions originate from background gas. (Right panel) Comparison between TOF spectra taken for  $D_2O$  in the gas phase at  $9.5 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$  laser intensity and ions emitted from the surface of 100 nm nanoparticles inhabited by  $D_2O$  molecules at a laser intensity of  $1 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$ . Only the spectrum associated with nanoparticles demonstrates the formation of  $D_2^+$ ,  $HD_2^+$ , and  $D_3^+$  ions.

If there were a significant exchange between  $D_2O$  and  $SiOH$  to generate deuterated silanols,  $D_3^+$  would have been formed through four different pathways (similar to  $H_3^+$  in the case of  $H_2O$  described above) and, consequently, the TOF spectra in Fig. 6 would have displayed a higher yield of  $D_3^+$  compared to  $H_3^+$  in the “ $D_2O$  on  $SiO_2$ ” experiments, as, in this case, the formation of  $D_3^+$  would have a pathway from deuterated silanol in addition to two hybrid pathways and one solely from  $D_2O$ . However, based on our FTIR spectra taken at different time intervals of the particles in  $D_2O$  solution and the observed TOF spectra, we do not find any evidence suggesting significant deuteration of silanols under our experimental conditions. A quantitative explanation of the processes involved in the formation of the high energy  $H_3^+$  and  $D_3^+$  ions observed in presented experiments defies existing theoretical models. Any theoretical model that is to be developed needs to properly account for the dynamics of laser-field-induced ionization and fragmentation of water molecules on the surface of nanoparticles.

**Part 2. High order harmonics generation: Simple systems.** In this section the results of both theoretical and experimental studies of high-order harmonics generation processes in “Simple” systems are presented. The “simplicity” is defined by consideration of only relatively small number electron configurations atomic systems – HHG from Lithium (Li) [Opt. Lett. 44, 3693-3696 (2019)] and Aluminum (Al) [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 245601 (2019)] LIPs; and HHG spectra simulation from simplest hydrogen molecule and ion –  $H_2$  and  $H_2^+$  [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 155405 (2020)].

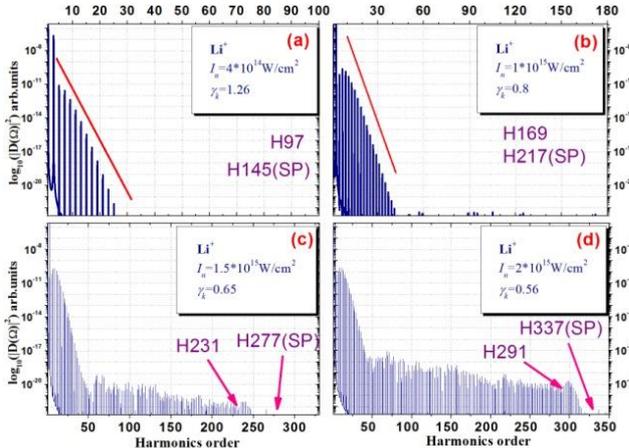
The theoretical background for all these three works was sufficiently similar - numerical calculations within the strong field approximation (SFA) approach, commonly referred to as the Lewenstein HHG model were used with different additional prerequisites or improvements. Lewenstein HHG model is involving three steps: tunnel ionization from the highest occupied bounded state, acceleration of the free electron in the laser field, and recombination of the electron to the state from which it originated. The last step leads to emission of a photon. Contribution of intermediate resonances is not taken into account, ignoring nuclear dynamics and considering the evolution of the molecular system only from the highest occupied atomic (AO) or molecular (HOMO) orbital.

First work in this section [Opt. Lett. 44, 3693-3696 (2019)] is devoted to the theoretical explanation of HHG spectra for Li LIPs. Targets of high ionization potential have been considered promising sources of short-wavelength HHG. This is attributed to the three-step model of HHG, where the cutoff energy is given by  $E_{\text{cutoff}} = I_p + 3.17U_p$ . Here,  $I_p$  is the ionization potential of the atom, and  $U_p$  is the ponderomotive energy of the electron in the laser field. One method to extend the cutoff energy is to use target materials that have high ionization potential (such as helium or neon) to reduce the effect of ionization. An alternative method to extend the HHG cutoff has been demonstrated by using alkali ions from a laser plasma source as the nonlinear medium. Their higher ionization potential will allow the increase of  $I_p$ , which should also contribute to increasing the cutoff energy. The analyzed experimental HHG spectra and the cutoff position showed strong mismatch with the expected contribution from Li ions with the highest second ionization potential of 75.6 eV, which potentially is making Li the most promising source of ultrashort wavelength coherent radiation, which hindered a proper interpretation of the observed extended cutoff position. Moreover, Li has the simplest electron configuration, among the solids at normal conditions, which makes it attractive for simulation and comparison with available experimental data. Additionally, we HHG spectra for Li ion and He atom were compared, since they both have closed 1s atomic orbital.



**Fig. 7.** [Fig. 1 in Opt. Lett. 44, 3693-3696 (2019)] HHG spectra  $P_i(\Omega)$  of 2s atomic orbital of Li atom for different laser intensities,  $I_n$  and  $\gamma_k$ . Cutoff position according to simple-man model and QO theory indicated on each figure with H[N] and H[N](SP) notations, where N is a number of harmonic. (a)  $I_n = 3 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$  and  $\gamma_k = 0.39$  (b)  $I_n = 3.5 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$  and  $\gamma_k = 0.36$ ; (c)  $I_n = 4 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$ ,  $\gamma_k = 0.33$ ; (d)  $I_n = 4.5 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$  and  $\gamma_k = 0.31$ .

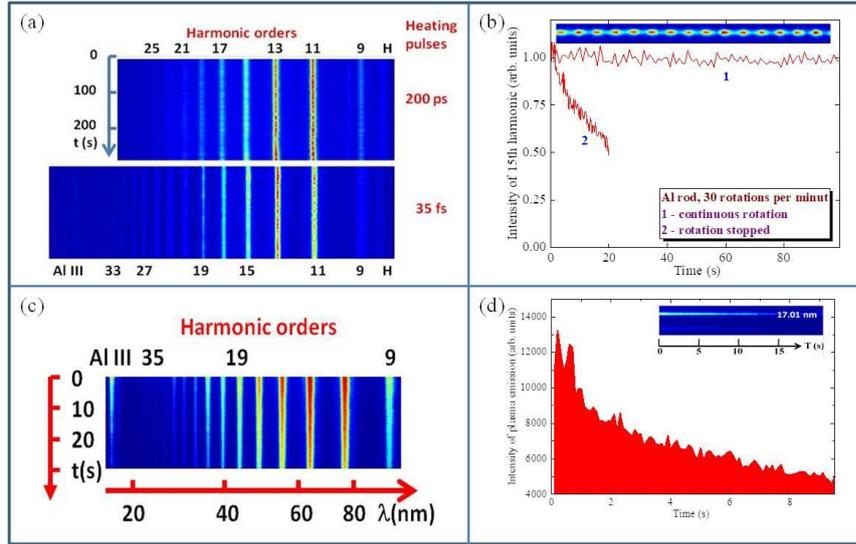
For the 2s atomic orbital of Li atom, with ionization energy 5.39 eV, we used an expansion in a set of 8 STO basis functions. The HHG spectra were calculated for parameters of laser field close to those used in the experiment with a wavelength equal to  $\lambda = 795 \text{ nm}$  and pulse duration  $T_p = 150 \text{ fs}$ . Results for  $P_i(\Omega)$  of 2s atomic orbital of Li atom are presented in Fig. 7, for different intensities and corresponding Keldysh parameter  $\gamma_k$ . For the range of laser intensities used,  $\gamma_k$  is less than 1, ensuring the validity of the tunneling model leading to well-defined plateau region. In the experiment, the shift of the cutoff position to higher orders was attributed to contributions from the singly charged Li ions, which possess high second ionization potential (75.64 eV). The barrier-suppression intensity for the singly-charged lithium ion is estimated to be  $3.2 \times 10^{16} \text{ Wcm}^{-2}$ , while  $I_{BSI} < 10^{12} \text{ Wcm}^{-2}$  for neutral Li atom. Therefore, it is expected that with such a small  $I_{BSI}$  for neutral Li, most of the atoms will be ionized already in the initial part of the 150-fs laser pulse. For Li, the cutoff would be around the 97-th order for laser intensity  $I_n = 4 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$ . However, the experiment had shown no influence on HHG cutoff position from singly charged ions. To further support the conclusion that singly charge ions do not contribute to the HHG cutoff, we analyzed the interactions using the Keldysh parameter for  $I_p = 75.64 \text{ eV}$  and  $I_n = 4 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$ . At these values,  $\gamma_k$  is equal to 1.26. Which means that the process is of multiphoton nature.



**Fig. 8.** [Fig. 2 in Opt. Lett. 44, 3693-3696 (2019)] HHG spectra  $P_i(\Omega)$  of 1s atomic orbital of  $\text{Li}^+$  ion for different intensities of laser field,  $I_n$  and  $\gamma_k$ . Cutoff position according to simple-man model and QO theory indicated on each figure with H[N] and H[N](SP) notations, where N is a number of harmonic. (a)  $I_n = 4 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$  and  $\gamma_k = 1.26$ ; (b)  $I_n = 1 \times 10^{15} \text{ Wcm}^{-2}$  and  $\gamma_k = 0.8$ ; (c)  $I_n = 1.5 \times 10^{15} \text{ Wcm}^{-2}$  and  $\gamma_k = 0.65$ ; (d)  $I_n = 2 \times 10^{15} \text{ Wcm}^{-2}$  and  $\gamma_k = 0.56$ .

Moreover, at these parameters, the applicability of the Lewenstein's model and SP approximation become questionable. Nevertheless, we performed calculations for the  $\text{Li}^+$  1s atomic orbital, and the results are presented in Fig. 8. We also carried out the QO estimation of the cutoff position at these conditions. In the case of Figs. 8(a) and 8(b), HHG spectra have the multiphoton nature. The slope function (red line), corresponds to the dependence of the form of  $\sim C_0(C_1 \times I_n)^k$ , where  $k$  is the harmonics order. Plateau harmonics start to appear only at very high driving pulse intensities, as can be seen in Figs. 8(c) and 8(d). It is clear that for  $\gamma_k > 1$  and  $\gamma_k \approx 1$  in the case of Li ions, the QO approach fails to describe the position of the cutoff. We see it in Fig. 8(b), for  $\gamma_k = 0.8$ , when again no plateau region and no harmonics at 169<sup>th</sup> order, and therefore, no harmonics at 217<sup>th</sup> order appear in the HHG spectra. Our calculations demonstrated that with parameters close to those used in the experiment, there is no cutoff extension.

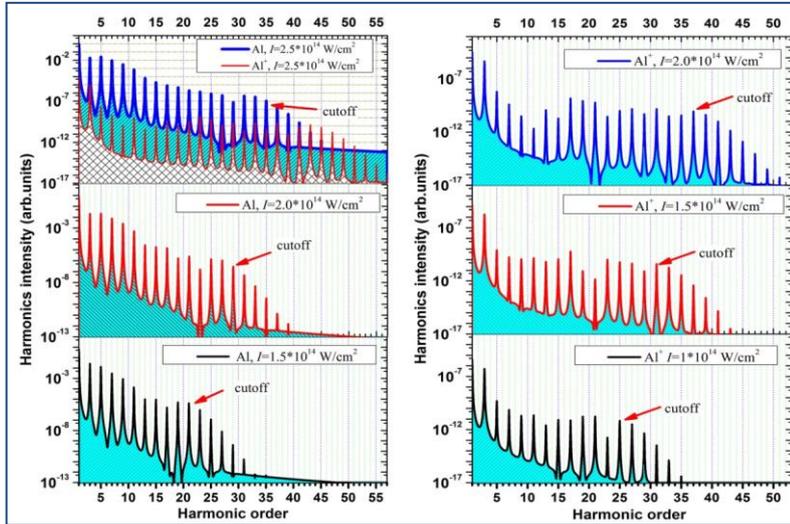
Similar problems of the stable aluminum LIP formation and HHG from this source were studied both theoretically and experimentally in [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 245601 (2019)]. From the experimental point of view conception of stable HHG from a rotary Al rod target was realized. The application of 35 fs pulses as the heating radiation allowed the extension of harmonic cutoff up to the 35<sup>th</sup> harmonic (54.2 eV, Fig. 9a). This figure shows the images of stable harmonics generation during ablation of the rotating Al rod. Our studies showed that stable harmonic emission in the case of rotating target (Fig. 9b, curve 1) was significantly worsened once the rotation stopped (see the curve 2 of Fig. 9b). The same can be said about the emission lines of Al in the shorter-wavelength range. Figs. 9c and 9d show the decay in the plasma emission at the wavelength of the Al III transition excited by femtosecond pulses. After ten seconds from stopping the rotation of Al rod the intensity of 17.01 nm line decreased by almost three times (Fig. 9c). The same was observed in the case of ablation by picosecond pulses. Inset in Fig. 9d shows the raw image of Al III plasma line at the wavelength of 17.01 nm excited using 200 ps, 800 nm heating pulses.



**Fig. 9.** [Fig. 4 in J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 245601 (2019)] Stability measurements of the plasma and harmonic spectra from the plasma produced on the rotating aluminum rod. (a) Combined images of HHG spectra collected during 5 min. The upper and bottom panels of spectra correspond to the heating of Al rod by 200 ps and 35 fs pulses respectively. (b) Time-dependent variation of the intensity of the 15th harmonic generated from the aluminum plasma produced by picosecond pulses. Curve 1 corresponds to a constant rotation of Al rod and curve 2 corresponds to the abrupt termination of rotation. Inset: snapshots of 15 pulses of H15 collected during 1.5 seconds of ablation of the rotating aluminum rod. (c) Decay of plasma emission (17.01 nm, Al III) and harmonics after abrupt stopping of rotation rod at the moment corresponding to 0 s. (d) Decrease of 17.01 nm emission excited by 35 fs pulses during ablation of stopped Al target. Inset: Image of the part of XUV spectrum showing the decay of 17.01 nm emission line of Al III excited by 200 ps pulses after stopping the rotation of ablating rod.

To address the observed harmonic cutoff in aluminum plasma we used the Lewenstein model of HHG. Al and Al<sup>+</sup> were modeled using simple hydrogen-like atomic orbitals. The first and second ionization potentials were taken equal to 5.98 eV and 18.83 eV. The results of our calculations are presented in Fig. 10. The positions of cutoff for each spectrum were estimated using the expression, where the cutoff was equal to the integer part of  $(I_p + 3.2U_p)/\omega$  ( $I_p$  is the potential of ionization,  $U_p$  is the quiver energy of electron and  $\omega$  is the frequency of laser). The evaluation of barrier suppression intensity gives us  $I_{BSI} = 2.6 \times 10^{13} \text{ Wcm}^{-2}$  for the first and  $I_{BSI} = 2.7 \times 10^{15} \text{ Wcm}^{-2}$  for the second ionization potentials. Our simplified model demonstrates some mismatch in the value of laser field intensity in the focal spot. According to calculations, HHG spectra achieve the H35 cutoff at  $I \approx 2.5 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$  for neutral Al atoms and at  $I \approx 2 \times 10^{14} \text{ W cm}^{-2}$  for Al<sup>+</sup>. The difference between experiment ( $I \approx 3.5 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$ ) and theory can be partially explained by the uncertainty of the experimental measurements of laser intensity. Although the presence of positively charged ions is confirmed by observation of the plasma emission, Lewenstein model predicts sufficiently lower conversion efficiency for

Al<sup>+</sup> ions. On the top left panel of Fig. 10 we show two HHG spectra from Al and Al<sup>+</sup> at laser intensity  $I \approx 2.5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ , one can compare the conversion efficiencies from two components of plasma, which is sufficiently lower in the case of Al<sup>+</sup> at the middle of HHG plateau and 2 orders of magnitude less in the cutoff region.

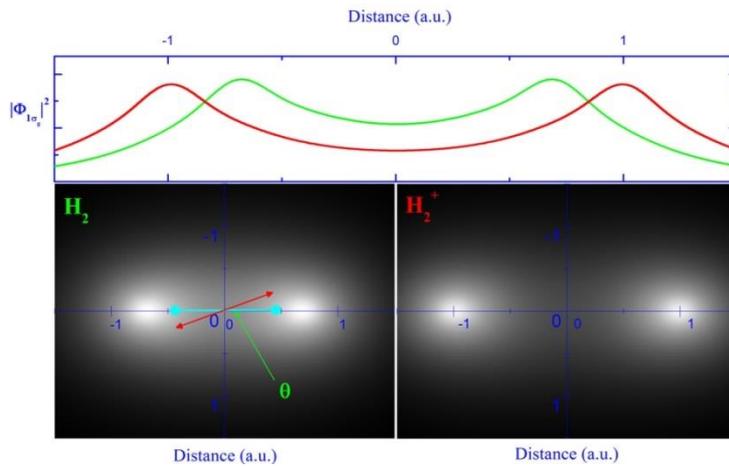


**Fig. 10.** [Fig. 3 in J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 245601 (2019)] Calculated harmonic spectra for Al (left panel) and Al<sup>+</sup> ion (right panel).

In [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 155405 (2020)] we address the problem of HHG from H<sub>2</sub> and H<sub>2</sub><sup>+</sup> molecules, which are very attractive for being the simplest molecular systems to test any theory. Moreover, previous predictions on HHG from those systems have not yet been supported by experimental measurements. We present a generalized approach, designated as GEX (Gaussian exact model), based on the representation of initial field-free active highest occupied molecular orbital (HOMO) as linear combination of atomic orbitals (LCAO) and apply it to the problem of HHG from H<sub>2</sub> and H<sub>2</sub><sup>+</sup> molecules. Since, by its own ideology of SFA, all information about spatial (including all symmetries) and momentum electron distribution are contained in the initial wavefunction, it is very important to build it in a proper way. Common ways are the application of tabulated data of Hartree–Fock–Roothaan solutions or the determination of the coefficients by using computational chemistry codes like GAUSSIAN or GAMESS. Additionally, depending on the choice, two types of basis sets appear for approximate representation of HOMO, Slater-type orbitals (STO) and Gaussian-type orbitals (GTO). We chose GTO basis since it allows us to get closed analytical expression for the induced molecular dipole moment. Using the obtained expression, we analyze HHG spectra for simplest diatomic molecules H<sub>2</sub><sup>+</sup> and H<sub>2</sub> with various laser parameters.

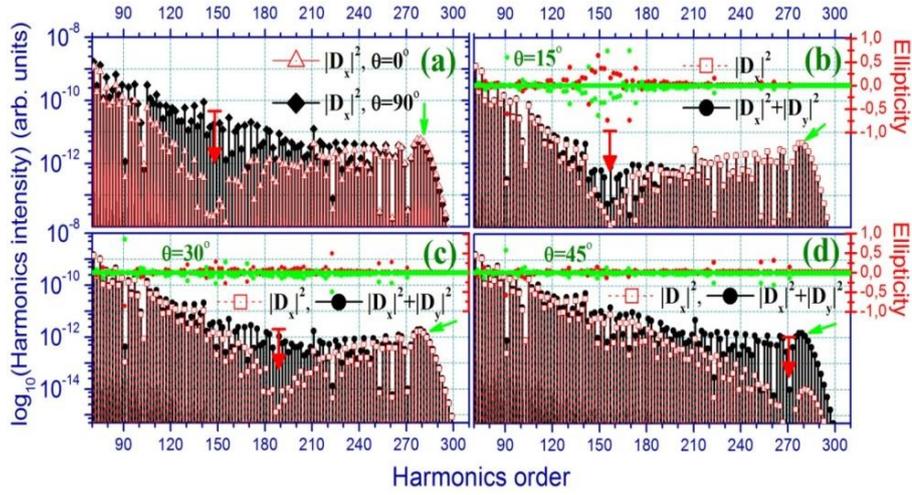
First of all, we defined the initial wavefunction of the active electron at the starting moment in the absence of a laser field. Fig. 11 shows the probability maps  $|\Phi|^2$

in the  $(x, y)$  plane for  $H_2$  (left bottom panel) and  $H_2^+$  (right bottom panel) molecules. These wavefunctions were obtained using the Gaussian 03 code, restricted Hartree–Fock (RHF) and unrestricted Hartree–Fock (UHF) model calculations with the STO-6G basis chosen in the case of  $H_2$  and  $H_2^+$  molecules, respectively. The internuclear distance is fixed at  $2 \times r_0 = 1.4$  a.u. for  $H_2$  and  $2 \times r_0 = 2$  a.u. for  $H_2^+$  (Fig. 11, top panel). Reproduced ‘vertical’ ionization energy for  $H_2$  and ionization potential for  $H_2^+$  are close to experimental values.



**Fig. 11.** [Fig. 1 in J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 155405 (2020)] Probability maps for  $H_2$  (left bottom panel) and  $H_2^+$  (right bottom panel) molecules plotted on the base of calculation of the Gaussian 03 code with schematic orientation (left bottom panel) of laser polarization axis (red arrow) and molecular axes (cyan line with 2 circles on ends).  $\theta$  is the angle between these two directions. On the top panel is plotted sectional view along molecular axis for  $H_2$  (green solid line) and  $H_2^+$  (red solid line)

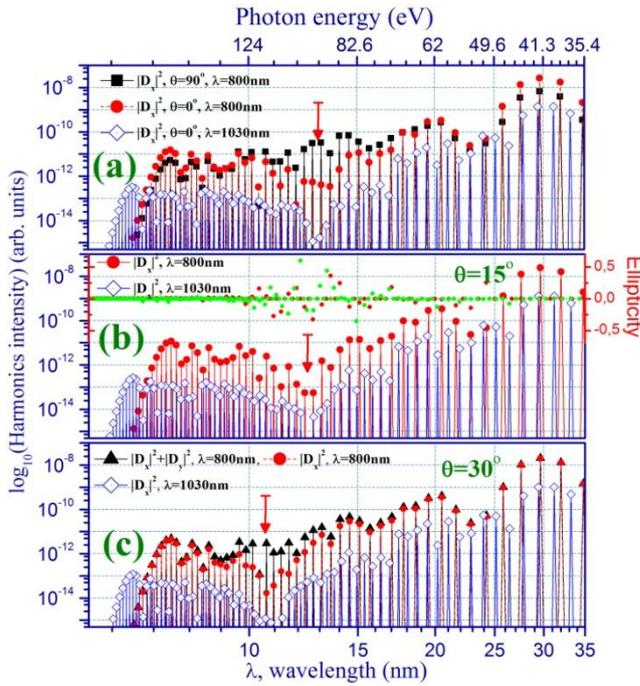
In Fig 12 we plot the results for  $\lambda = 1300$  nm and  $I_n = 5 \times 10^{14}$  Wcm $^{-2}$ . At these parameters of laser field we have  $N_{\text{cutoff}} = 281$ . Panel (a) of Fig. 3 shows the spectra for the limiting cases  $\theta = 0^\circ$  (open red triangles) and  $\theta = 90^\circ$  (filled black rhombuses). Here we observe a well-determined minima in the plateau at around the 145<sup>th</sup> harmonic for  $D_x$  at  $\theta = 0^\circ$ . Since the minimum is placed deep inside the plateau, its valley does not affect the cutoff region. The interference minima travel at  $\theta = 15^\circ, 30^\circ$  and  $45^\circ$  (panels (b), (c) and (d)) for the  $D_x$  component parallel to laser field (open red square), with the positions of minima corresponding to 155<sup>th</sup>, 189<sup>th</sup>, and 269<sup>th</sup> orders. For panels (b), (c) and (d) the total spectral intensity  $W$  (black filled circles) was calculated since the existence of the non-zero contribution of  $D_y$ . One can again see that with increasing  $\theta$  the effect of minima vanishes. This feature is clearly seen on panels (c) and (d) where we have the flat plateau region for  $W$ . As a result, it will be impossible to recognize the presence of minima at high  $\theta$  in the experiments with harmonics detectors based on intensity or photons counting techniques. Another conclusion is a requirement of very accurate orientation of molecules in space by prepulse, since the interference minima is well observed only for narrow angles at around  $\theta = 0^\circ$  as well as the dependence of interference minima position on the molecular angle can shift its position beyond plateau region.



**Fig. 12.** [Fig. 3 in J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 155405 (2020)] Calculated harmonic spectra for  $H_2$  molecule with  $\lambda = 1300$  nm and  $I_n = 5 \times 10^{14}$  Wcm $^{-2}$ . Red arrows show the positions of the minima and green arrows indicate the cutoffs. Panel (a) presents the HHG spectra for  $D_x$  component at  $\theta = 0^\circ$  (red open triangles) and  $\theta = 90^\circ$  (black filled rhombus). Panel (b) shows the spectra for  $D_x$  component (open red squares) and  $W = |D_x|^2 + |D_y|^2$  (filled black circles) at  $\theta = 15^\circ$ ; inset presents the calculated ellipticity for  $\theta = +15^\circ$  (solid red circles) and  $\theta = -15^\circ$  (solid green circles). Panel (c) shows the spectra for  $D_x$  component (open red squares) and  $W$  (filled black circles) at  $\theta = 30^\circ$ ; inset presents the ellipticities for  $\theta = +30^\circ$  (solid red circles) and  $\theta = -30^\circ$  (green solid circles). Panel (d) shows the spectra for  $D_x$  component (open red squares) and  $W$  (filled black circles) at  $\theta = 45^\circ$ ; inset presents the ellipticities for  $\theta = +45^\circ$  (solid red circles) and  $\theta = -45^\circ$  (green solid circles)

Concerning polarization properties, our model predicts the existence of elliptically polarized harmonics at around the spectral minima at small values of  $\theta$ . This peculiarity is demonstrated in panel (b) of Fig. 12. The ellipticity of harmonics are plotted with solid red and green circles, corresponding to the rotation of molecular axis in positive ( $\theta = +15^\circ$ ) and negative ( $\theta = -15^\circ$ ) directions. Panels (c) and (d) of Fig. 12 show that, with increasing angle  $\theta$ , the ellipticity decreases. However, since the  $D_y$  compensates a decrease of  $D_x$  in the region of minima, the polarization direction of harmonics becomes oriented along y direction, thus remaining linearly polarized. This effect is strongly expressed for cutoff harmonics at  $\theta = 45^\circ$  in panel (d) of Fig. 12. At the present moment there is no experimental HHG polarimetry measurements for  $H_2/H_2^+$  molecules, but in [X. Zhou et. al “Elliptically Polarized High-Order Harmonic Emission from Molecules in Linearly Polarized Laser Fields” Phys. Rev. Lett. 102, 073902] was found that harmonic emission from nitrogen  $N_2$  can be strongly elliptically polarized even when driven by linearly polarized laser fields. In Fig. 13 we present the calculated HHG spectra from  $H_2^+$  ion at different laser parameters and  $\theta$ . HHG spectra at  $\lambda = 800$  nm are combined for  $\theta = 0^\circ$  and  $\theta = 90^\circ$ , since the interference minimum in the former case is not so pronounced and it is simpler to recognize it with regard to the background spectrum at  $\theta = 90^\circ$ . The positions of minima for these wavelengths are at around  $\lambda_H = 13$  nm (61<sup>th</sup> and 79<sup>th</sup> orders). Panels (b) and (c) show

the positions of minima for  $\theta = 15^\circ$  and  $30^\circ$ . One can see that, for small angles ( $0^\circ$  and  $15^\circ$ ), the positions of minima almost coincide with each other. Inset in panel (b) demonstrates the polarization properties of emitted harmonics for  $\lambda = 800$  nm (solid red circles) and  $\lambda = 1030$  nm (solid green circles). The group of harmonics at around minima are elliptically polarized, similarly to the cases shown in Fig. 12. Panel (c) shows the total intensity  $W$  at  $\lambda = 800$  nm (black filled triangles) where the minimum was suppressed since the  $D_y$  component becomes dominant.



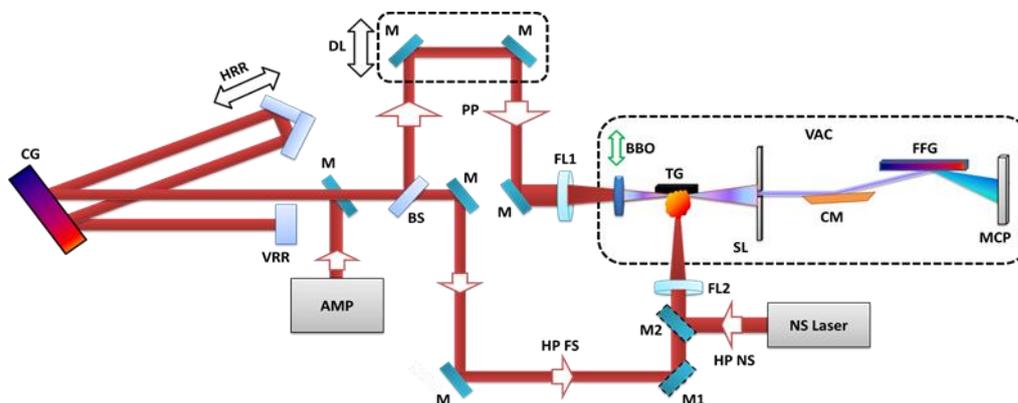
**Fig. 13.** [Fig. 5 in J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 155405 (2020)] Calculated harmonic spectra for  $H_2^+$  ion. Red arrows show the positions of interference minima. Panel (a) shows the HHG spectra for  $D_x$  component of at  $\theta = 0^\circ$ , with  $\lambda = 800$  nm,  $I_n = 7 \times 10^{14}$   $Wcm^{-2}$  (filled red circles), at  $\theta = 90^\circ$ , with  $\lambda = 800$  nm,  $I_n = 7 \times 10^{14}$   $Wcm^{-2}$  (filled black squares), and at  $\theta = 90^\circ$  with  $\lambda = 1030$  nm,  $I_n = 5 \times 10^{14}$   $Wcm^{-2}$  (open blue rhombuses). Panel (b) shows the HHG spectra for  $D_x$  component at  $\theta = 15^\circ$ , with  $\lambda = 800$  nm,  $I_n = 7 \times 10^{14}$   $Wcm^{-2}$  (filled red circles) and with  $\lambda = 1030$  nm,  $I_n = 5 \times 10^{14}$   $Wcm^{-2}$  (open blue rhombuses). Inset shows the ellipticity of harmonics. Panel (c) shows the HHG spectra for  $D_x$  component at  $\theta = 30^\circ$ , with  $\lambda = 800$  nm,  $I_n = 7 \times 10^{14}$   $Wcm^{-2}$  (filled red circles) and with  $\lambda = 1030$  nm,  $I_n = 5 \times 10^{14}$   $Wcm^{-2}$  (open blue rhombuses), and total harmonic yield  $W$  at  $\theta = 30^\circ$ , with  $\lambda = 800$  nm,  $I_n = 7 \times 10^{14}$   $Wcm^{-2}$  (filled black triangles).

Generalization of GEX model, combined with LCAO representation of HOMO allowed us to analytically calculate the three-dimensional integrals over momentum, without using Saddle-point technique. We have demonstrated the explicit influence of HOMO symmetry on such a peculiarity of HHG spectra, as the presence of interference minima. We confirmed the conclusions of the numerical simulations on the base of direct TDSE solution that the position of interference minima in HHG spectra does not depend on the parameters of laser radiation, such as wavelength and intensity. The position of minima strongly depends only on the internuclear distance in molecule for bonding molecular orbital and angle  $\theta$  between the polarization direction of linearly polarized laser field and the molecular axis. We have demonstrated that the polarization properties of harmonics around the minima region strongly change with variation of  $\theta$ .

**Part 3. High order harmonics generation: Complex phenomena.** This section is devoted to complex phenomena, observed in process of HHG in gases and LIPs containing resonant-possessing materials, nanoparticles and combined with multi-jet

LIPs formation conditions and by altering properties of pumping pulses. In [New J. Phys. 22, 083031 (2020)], the systematic study of control Cooper minimum in Ar gas with the change of pumping conditions was presented. Generation of single, enhanced resonant harmonics from Molybdenum LIP was studied both theoretically with solving TDSE and experimentally in [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 195401 (2020)]. Joint effect of structured, multi-jet plasma plumes application to the materials possessing resonant-enhanced harmonics are studied in [Opt. Continuum 1, 1098-1116 (2022)]. Results with HHG from LIPs containing nanoparticles made of metal and semiconductor carbide materials are presented in [Nanomaterials 12, 4228. (2022)].

Most of experimental results of works presented in current and previous sections are obtained with HHG facilities built by our group at Changchun Institute of Optics, Fine Mechanics and Physics (CIOMP, China) and at American University of Sharjah (AUS, United Arab Emirates). The common scheme of HHG facility can be presented by Fig. 14.

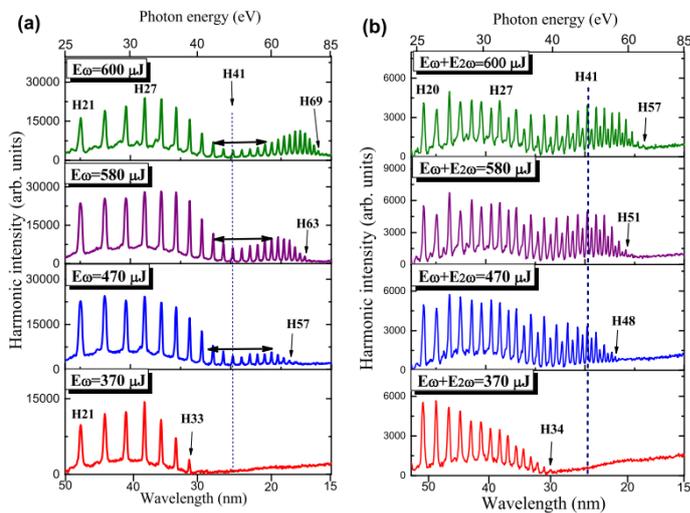


**Fig. 14.** The common experimental scheme of HHG.

The uncompressed picoseconds laser pulse after amplifier (AMP) is directed by a mirror (M) to the compressor comprising the compressing grating (CG), vertical retroreflector (VRR), and horizontal retroreflector (HRR). The compressed probing pulse (PP) propagates through the optical delay line (DL) and then focuses through a spherical focusing lens (FL1) inside the vacuum chamber (VAC) comprising the target chamber and XUV spectrometer. The focused pulses propagate through the 0.2 mm thick barium borate (BBO) crystal to generate a second harmonic (SH) beam for the two-color pump of plasma. The femtosecond/picoseconds/nanosecond heating pulses (HP FS) are focused by a focusing lens (FL2) on the target (TG) to ignite the laser plasma. Optionally, nanosecond heating pulses (HP NS) can be used. The generated harmonics and fundamental radiation propagate through the slit (SL) and enter the XUV spectrometer comprising the gold-coated cylindrical mirror (CM), flat-field

grating (FFG), and micro-channel plate (MCP). M1 and M2 are the mirrors on flipping mounts for selecting either between femto/pico or nanosecond heating pulses.

The observation of distinct local minimum in the high-order harmonic emission from noble gas targets can be considered as fingerprint of presence of so-called Cooper minimum (CM), which is also present in the XUV photoionization of noble gases. The appearance of the minimum in the harmonic's distribution from single-atom HHG spectrum of Ar has been attributed to radiative recombination of an electron to atomic ion, which is the inverse process of photoionization where the cross section has a minimum. It was demonstrated in [New J. Phys. 22, 083031 (2020)] the application of two orthogonally-polarized fields of fundamental radiation and its second harmonic, which is also used to generate controllable yields of odd and even harmonics, led to diminishing the CM in the harmonic spectra.

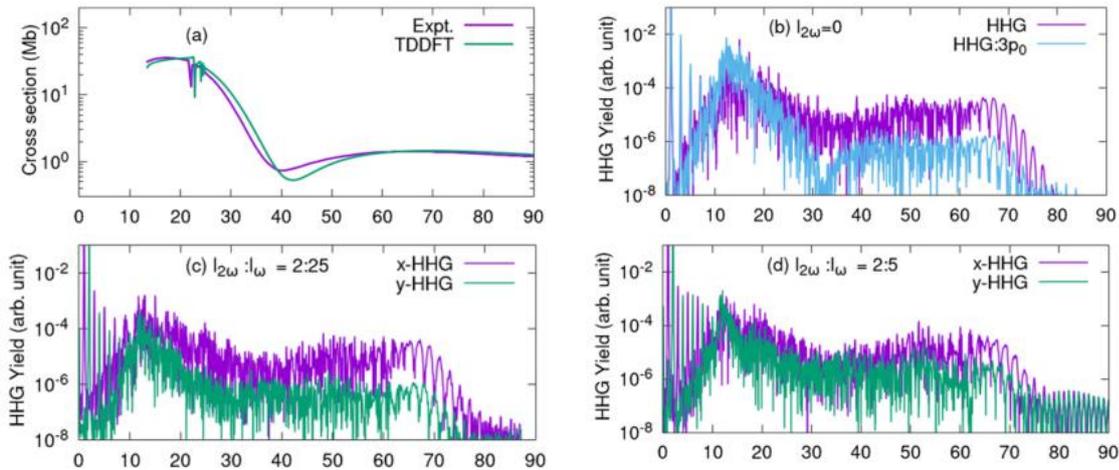


**Fig 15.** [Fig. 3 in New J. Phys. 22, 083031 (2020)] Spectra of harmonics generated in Ar at different experimental conditions. (a) Modification of cutoff energy by changing the diameter of the iris placed in front of the focusing spherical lens in the case of single-color pump (1030 nm). The dashed black line shows the position of CM at the photon energy  $\sim 49 \text{ eV}$  (H41). The solid arrows show the width of CM. (b) Same dependences are presented in the case of orthogonally polarized two-color pump (1030 nm + 515 nm) of argon, which show the absence of CM. Dashed black line in this figure shows the position of CM in the case of a single-color pump.

The intensities of different harmonics as well as the width and depth of CM were analyzed at different experimental conditions, particularly by varying the intensity and spatial conditions of the driving 1030 nm pulses and by using a two-color laser pump, as shown in Fig. 15. In these experiments the driving beam sizes were changed using an iris with variable diameter. Also, the gas jet was moved at different positions with respect to the focal plane of focusing lens. The disappearance of CM by changing the phase-matching conditions based on the defocusing-assisted phase mismatch of the driving pulses in Ar is shown in Fig 15(a) [ $E_\omega = 470 \mu\text{J}$ , at the 12 mm beam diameter after the iris]. We also analyzed the dependence of CM width on the energy of the driving laser pulses. The panels in Fig. 15(a) show the dependence of harmonic cutoff energy on the energy of the driving femtosecond pulses. The increase of the energy of laser pulses led to increase in the cutoff energy. During these experiments, harmonics up to the 69<sup>th</sup> order [ $\lambda = 14.9 \text{ nm}$ , upper panel of Fig. 15(a)] were observed. In the case

of two-color pump scheme, no CM was observed with the variation of the beam diameter [Fig. 15(b)], but, strong odd and even harmonics yields were observed as a function of the total energy of the driving and SH pulses ( $E_\omega + E_{2\omega}$ ).

For the theoretical explanation of the underlying Ar HHG mechanisms the time-dependent Schrödinger equation was numerically integrated. Since orthogonally-polarized laser fields were used in the experiment, solution for full three-dimensional TDSE is presented. To consider the focal volume effect and phase matching in the propagation, the TDSE was solved thousand times for different IR intensities and different ratios of the two-color laser fields. Since CM may be washed out after the phase matching process, the atomic HHG without the focal volume averaging and phase matching was presented first to study the dynamics of the CM in HHG at the atomic level. The convergence of the simulation was checked by comparing the results from length and acceleration forms and only the HHG in the acceleration form is presented. Fig. 16 shows the HHG of Ar atoms in orthogonally-polarized laser fields. Also the experimental single photoionization cross section and simulations based on the linear response theory are plotted.

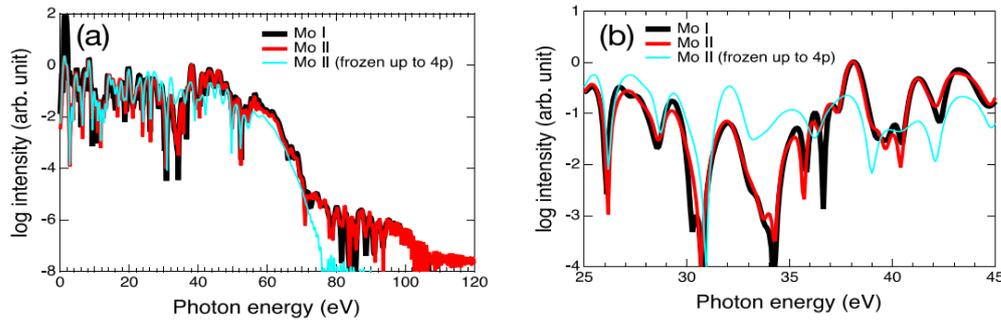


**Fig. 16.** [Fig. 5 in New J. Phys. 22, 083031 (2020)] (a) Ar single photoionization cross sections from the experiment and simulations. Variation of HHG spectra generated from Ar atoms in two-color laser fields for (b)  $I_\omega:I_{2\omega} = 1:0$ ; (c)  $I_\omega:I_{2\omega} = 25:2$ ; and (d)  $I_\omega:I_{2\omega} = 5:2$  with  $I_\omega = 2 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$

In the simulations, the polarizability was directly calculated, with its real part relating to the refractive index of Ar gas, and the imaginary part representing the photoabsorption as shown in Fig 16(a). Simulations are in good agreement with the measurements for the photoionization as shown in Fig. 16(a). The single photoionization cross-section to the d-partial wave reaches zero or CM around 40 eV, which is lower than the measured one. There is no CM for the  $3p \rightarrow s$ -partial wave in that energy regime, and the cross-section is much smaller. In the simulations, the z-direction as the propagation direction of the IR pulses, and the x-direction as the

direction of polarization were chosen. The polarization of the second harmonic laser field is along the y-direction. To clearly show the physical origin of the CM, plot the HHG from Ar  $3p_0$  (with magnetic quantum number = 0) in the single color laser field in Fig 16(b). During the conservation of the magnetic quantum number, the  $3p_0$  state can only reach a state with magnetic quantum number  $m = \pm 1$ , not an s-state by a photon polarized in the x-direction, therefore, s-partial wave does not contribute to the HHG and there is very deep minimum around harmonic order of 30. This shows that the present model potential can be used to investigate the CM qualitatively although it differs from the measured one in position. Without the second harmonic laser, the HHG shows a clear CM in the power spectra as shown in Fig 16(b) even after we sum all the contributions from  $3p_{\pm 1}$ ,  $3p_0$  states coherently (the subscripts stand for the magnetic quantum numbers). The position is shifted and the width is broadened by the IR laser field due to the ac stark shift. The CM exists even in a very strong laser field. When a second harmonic laser field (polarized in the y-direction) orthogonal to the fundamental one (polarized in the x-direction) is added, both even and odd harmonics appear with even harmonics polarizing along the y-direction and odd harmonics polarizing along the x-direction as shown in Fig 16(c). As the intensity of the second harmonics increases further, as shown in Fig 16(d), the CM almost disappears.

The enhancement of harmonics in the vicinity of 32 nm while generating them in the Mo laser-produced plasma is presented in [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 195401 (2020)]. Resonant harmonic is analyzed using various methods to optimize amplification process. The role of a strong ion transition with a large oscillator strength leading to an increase in the nonlinear optical response is discussed. The experimental findings were compared with numerically simulation of HHG from Mo using state-of-the-art implementation of an all-electron three-dimensional real-time ab-initio method called the time-dependent complete-active-space self-consistent-field (TD-CASSCF) method. In this method, the all-electron total wave function is expressed by the following superposition of Slater determinants consisting of time-dependent spin-orbital functions. The harmonic spectra obtained for Mo I and Mo II as the initial system for a laser pulse with 806 nm central wavelength,  $2 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$  peak intensity, and foot-to-foot four-cycle  $\sin^2$  pulse shape are shown in Fig. 17. The curves for Mo I (black) and Mo II (red) mostly overlap each other, since the neutral Mo is quickly ionized to produce Mo II plasma.



**Fig 17.** [Fig. 7 in *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 53, 195401 (2020)] (a) HHG spectra calculated starting from Mo I (black) and Mo II (red). The spectrum for Mo II calculated with frozen core up to 4p (light blue). (b) Close-up.

We can see enhancement around 38 eV (32.6 nm, ~H25) and suppression around 33–34 eV (~36–38 nm, ~H21–H22) which well reproduce the experimental features discussed in Fig 18 below. In Fig. 17 is also shown the spectrum calculated for Mo II with up to 4p orbitals treated as frozen core in the simulation (light blue). Freezing 4s and 4p leads to disappearance of both features, which implies that the dynamics of 4s and/or 4p is relevant with them. The experimental results for 806 nm driving pulse energy on the variation and enhancement of harmonics from Mo plasma at the conditions of TCP (806 nm + 403 nm) is shown in Fig 18(a). The increase of driving pulse energy from 0.5 to 1.3 mJ caused both the enhancement of conversion efficiency of H2 and the growth of harmonic yield along the whole range of their observation. Notice the appearance of the group of enhanced harmonics with the increase of the energy of DP. The interesting observation is the stronger H26 compared with H25, which demonstrates the optimization of resonance-induced process for the harmonic order, which is better suited to the optimal phase relations between the driving field and even harmonic (H26). The shift of the optimal harmonic order (from H25 towards H26) is clearly seen. Experimental results on the role of 806 nm driving pulse energy on the variation and enhancement of harmonics from Mo plasma at the conditions of TCP (806 nm + 403 nm) is shown in Fig 18(a). The increase of driving pulse energy from 0.5 to 1.3 mJ caused both the enhancement of conversion efficiency of H2 and the growth of harmonic yield along the whole range of their observation. Notice the appearance of the group of enhanced harmonics with the increase of the energy of DP. The interesting observation is the stronger H26 compared with H25, which demonstrates the optimization of resonance-induced process for the harmonic order, which is better suited to the optimal phase relations between the driving field and even harmonic (H26). The shift of the optimal harmonic order (from H25 towards H26) is clearly seen once one compares two bottom panels of Fig 4(a) showing the harmonic spectra in the case of TCP and SCP, respectively.

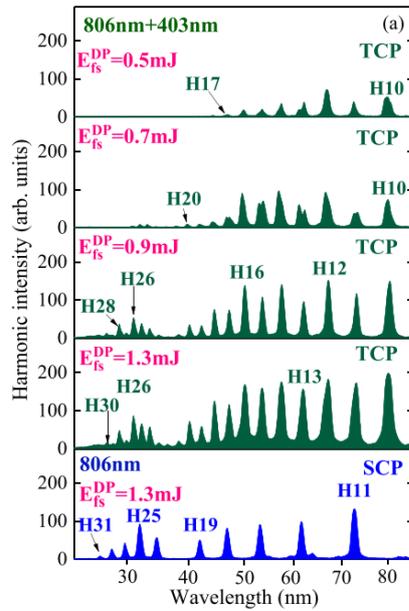
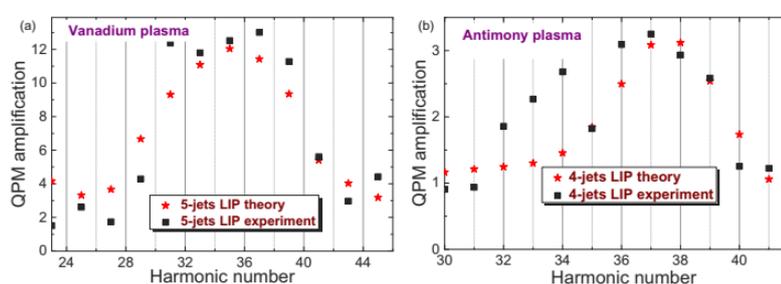


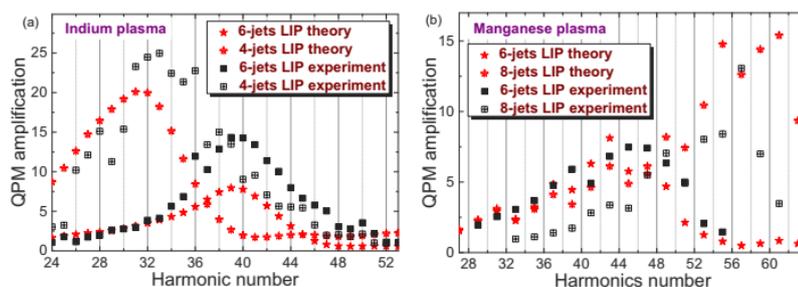
Figure 18. [Fig. 4 in J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 195401 (2020)] (a) Dependence of harmonic spectra distribution at different energies of the DP at the conditions of TCP of Mo LIP (four upper panels). The bottom panel shows the spectrum obtained in the case of SCP.

The comparison of two processes, resonance harmonic generation and quasi-phase-matching, resulting in the enhancement of the high-order harmonics of ultrashort pulses during propagation through different laser-induced plasmas (vanadium, antimony, indium, and manganese) is presented in [Opt. Continuum 1, 1098-1116 (2022)]. The tuning of maximally enhanced harmonics during quasi-phase-matching in multi-jet plasmas with simultaneous enhance of the resonantly-enhanced harmonics are demonstrated. Theoretical calculations supporting experimentally observed single harmonic enhancement (SHE) in the frame of four-step model and quasi-phase-matching (QPM) of a group of harmonics phenomenon in LIP independently of SHE, within the framework of the interference model and the nonperturbative approach were performed. Within the selected framework the medium was represented as a series of atoms interacting with a laser field, having parameters depending on the position of the atom in the medium. Due to the propagation in the medium, the parameters of the laser field change from atom to atom. The response of individual atoms is calculated in the framework of the nonperturbative theory (amplitudes and phases of harmonics and its dependencies over the position of the atoms inside the LIP extracts from numerical experiments). The total response of the photoemission of the medium is calculated following the interference model (as a sum of coherently generated emitters). The parameters of the laser fields (intensities of single and two-color laser field components, their temporal widths, and delay times between the components of two-color laser fields) and the plasma parameters (such as widths of LIP jets, their number, densities of plasmas) were selected in accordance with the experimental data. Parameters of the laser field change during the propagation in the LIP due to dispersion. The influence of plasma is taken into account by the Lorentz theory. Reabsorption of the generated radiation is not taken into account.

The results of numerical calculations of the QPM enhancement of harmonics in the four studied plasmas are shown in Figs. 19 and 20 (indicated by stars). The experimentally measured QPM enhancements are also shown in Figs. 19 and 20 for direct comparison (indicated by squares). The positions of the maximally enhanced harmonics calculated numerically and measured experimentally, almost coincide with each other. Moreover, the calculated values of the QPM enhancement also correspond to the experimentally measured ones. The results of numerical calculations allow us to separate the influence of QPM and SHE: in all calculated cases, the influence of QPM on the resonance-enhanced harmonic is constructive. As a result, in most cases, the decrease in the number of ions is compensated by a small addition of QPM-induced enhancement of “resonance” harmonics.



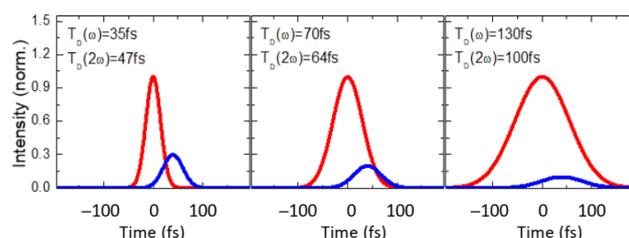
**Fig. 19.** [Fig. 6 in Opt. Continuum 1, 1098-1116 (2022)] (a) Calculation of QPM enhancement in vanadium plasma presented in the case of perforated plasma (red stars). Experimentally measured QPM enhancement is presented for comparison (black squares). (b) Calculation of QPM enhancement in antimony plasma. Experimentally measured QPM enhancement is presented for comparison (black squares)



**Fig. 20.** [Fig. 7 in Opt. Continuum 1, 1098-1116 (2022)] (a) Calculation of QPM enhancement in indium plasma. Experimentally measured QPM enhancement is presented for comparison by black squares and by black open crossed squares. (b) Calculation of QPM enhancement in manganese plasma. Experimentally measured QPM enhancement is presented for comparison by black squares and by black open crossed squares.

The latter makes it possible to observe a slight growth of the harmonics enhanced by resonance in all cases, except for the case of 8 jets of manganese plasma and for both investigated cases of indium plasma, since the position of maximally enhanced QPM harmonics for these cases are far away from the "resonant" harmonics for these types of plasma. Carbon-containing plasma is proved to be an attractive medium for

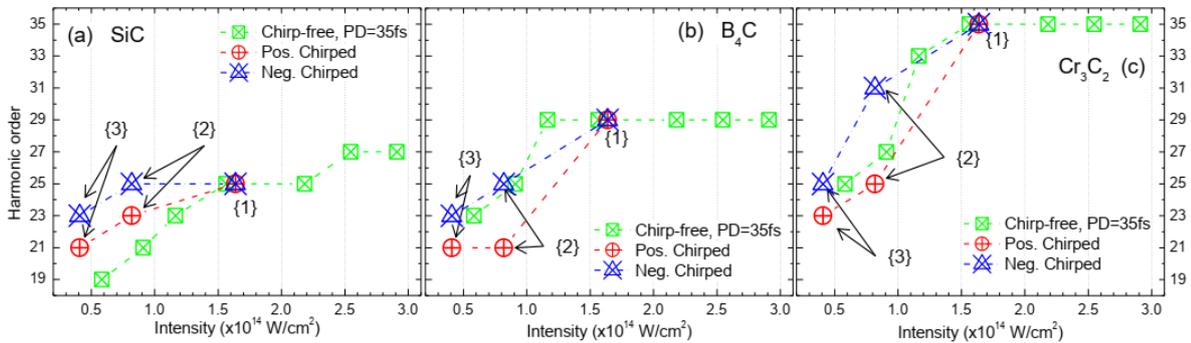
harmonics generation. Some compounds of carbon with other elements (carbides) can cause the combination of the advanced nonlinear optical properties of two components. The molecules containing metals and carbon (metal carbides) also can be used for HHG and analyzed by different methods such as the application of chirped pulses, two-color pump, and different ablation methods. An interesting additional option is the use of nanoparticles containing such molecules since NPs proved to enhance the harmonic yield. In paper [Nanomaterials 12, 4228. (2022)] was experimentally demonstrated the harmonic generation in the SiC, B<sub>4</sub>C and Cr<sub>3</sub>C<sub>2</sub> NPs-containing plasmas. Various parameters of HHG in these LIPs were examined. The simplified two-color pump model calculations of HHG based on the strong field approximation were used for the experimental data analysis. The change from chirp-free 35 fs pulses to the positively/negatively chirped pulses was performed by tuning a distance between CG and HRR (see Fig. 14) symmetrically, from the point of view of the pulse duration measurements using the autocorrelation technique. The pulse energy was not changed during the variations of laser chirp. So, we have the pairs of pulses with the same 70 fs and 130 fs pulse durations but possessing opposite signs of the chirp. Fig. 21 shows three groups of temporal shapes of chirp-free and chirped 70- and 130-fs pulses determined numerically. Fig. 22 shows the comparison of experimentally measured cutoff harmonic orders in three scenarios. The first scenario, plotted with green crossed squares is the variation of cutoff position with the change of chirp-free 35 fs pulse energy. The pulse's energy was tuned by the controlled pump of the laser amplifier (PUMP and AMP in Fig. 14). Starting from the maximal intensity defined for each material, one can see the saturation effect, when increasing the PP does not increase the cutoff order.



**Fig. 21.** [Fig. 3 in Nanomaterials 12, 4228. (2022)] The modelled broadening of pulses and the relative time positions of SH pulses (blue curve) compared with the fundamental pulses (red curves) after passing through the 0.2 mm thick BBO crystal. The intensity of SH is increased by a factor of 4 for better visibility.  $T_D(\omega)$  and  $T_D(2\omega)$  are the pulse durations for fundamental and SH pulses.

Other two scenarios plotted with red and blue crossed symbols in Fig. 22 present the dependencies of cutoff position in the case of variations of chirp. Red symbols correspond to the path of increasing positive chirp by points  $\{1\} \rightarrow \{3\}$  and blue—the path of increasing negative chirp by points  $\{1\} \rightarrow \{3\}$ . Point  $\{2\}$  and  $\{3\}$  designate chirped pulses with the same measured by autocorrelation technique pulse durations,

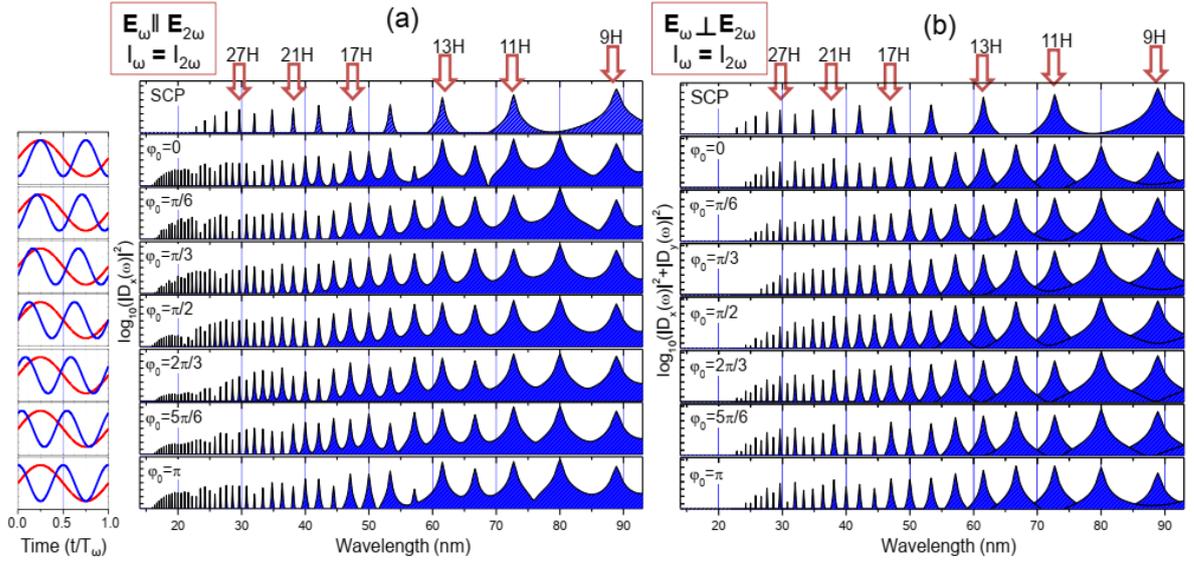
70 fs and 130 fs correspondingly, but opposite signs of chirp. Point {1} designates share points where red and blue curves achieve chirp-free 35 fs pulse by tuning a distance between CG and HRR.



**Fig. 22.** [Fig. 5 in Nanomaterials 12, 4228. (2022)] Cutoff position dependencies for (a) SiC, (b) B<sub>4</sub>C, and (c) Cr<sub>3</sub>C<sub>2</sub> NP plasmas at different PP intensities for chirp-free 35 fs pulses (crossed green squares), positively chirped pulses (crossed red circles), and negatively chirped pulses (crossed blue triangles). Point {2} and {3} designate chirped pulses with the same pulse durations, 70 fs and 130 fs correspondingly, but possessing opposite signs of chirp. Point {1} designates share points where red and blue curves achieve chirp-free 35 fs pulse by tuning distance between CG and HRR (see Fig 14).

For all three materials, the initial point {1} is chosen  $PP = 1.65 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$ . The pulse energy along paths {1}→{3} was not changed. In the case of B<sub>4</sub>C and Cr<sub>3</sub>C<sub>2</sub> NPs (Fig. 22b,c), starting intensity point {1} is placed close to or into saturation range and we can see the common behavior for chirp-free (green crossed squares) and negatively chirped paths, while moving along the positive sign of chirp the path reduced the cutoff position. In the case of SiC NPs (Fig. 22a), the starting point {1} is placed below the saturation intensity. While the negative/positive chirp paths demonstrate similar pattern, the relative position for chirp-free path was changed.

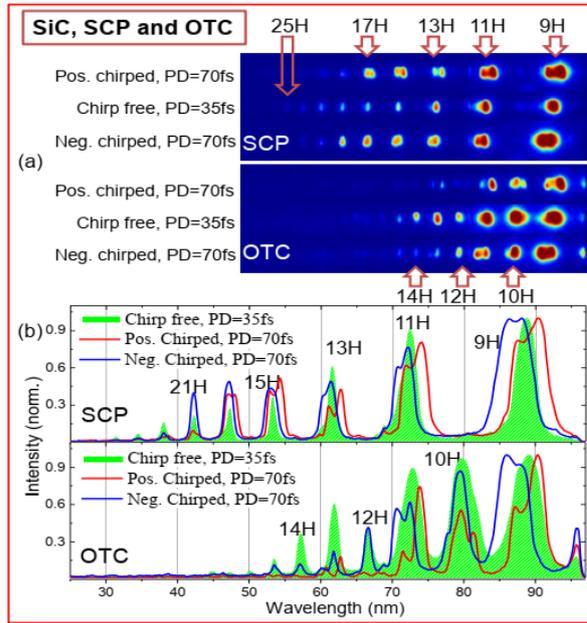
The simplified two-color pump model calculations based on the strong field approximation, commonly referred to as the Lewenstein HHG model are presented on Fig. 23, showing the results of HHG calculation where the values of  $I_p$  and  $I_\omega$  correspond to the experimental results of SiC LIP presented in Fig. 24.



**Fig. 23.** [Fig. 6 in Nanomaterials 12, 4228. (2022)] Calculated HHG spectra for PTC (a) and OTC (b). The  $\phi_0$  designates a relative phase shift for  $\omega$ - $2\omega$  fields, schematically presented in first column by red (800 nm) and blue solid (400 nm) lines. The intensities of  $\omega$  and  $2\omega$  are equal, while the orientation of polarization vectors is parallel in panel (a) and orthogonal for panel (b). Upper panels (SCP) present the calculated HHG with only 800 nm field.

The ionization potential  $I_p$  was deduced for  $I_\omega = 1.65 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$  and the cut-off position from Fig. 22a corresponded to  $I_p = 9 \text{ eV}$ . In details, to obtain “semiempirical” ionization potential  $I_p$ , point on the cut-off/intensity chirp-free curve on Fig. 22a was taken in area before saturation region, where with increase of probing pulse intensity cut-off position is not raising. For the taken point semiempirical formula  $I_p = N_c \cdot \omega - 3.17U_p$  from [P.B. Corkum “Plasma perspective on strong field multiphoton ionization,” Phys. Rev. Lett. 71, (1994)] was used. Here  $N_c$  – cut-off position,  $U_p$  – quiver energy of electron in laser field. The calculations are presented in the case of equal intensities of  $\omega$  and  $2\omega$  fields ( $I_\omega = I_{2\omega}$ ) while their polarizations were orthogonal or parallel to each other. For simplicity,  $E_\omega$  is always oriented along the x-axis, while  $E_{2\omega}$  is oriented along either x-axis or y-axis. For comparison, the 800 nm pump is presented with top row HHG spectra (Fig. 23, SCP). Harmonic spectra with different phase shifts  $\phi_0$  are presented between 0 and  $\pi$  with a  $\pi/6$  step. The corresponding profiles of  $\omega$  and  $2\omega$  fields are shown in the first column of Fig. 23 with red and blue solid lines in a time range of single period for fundamental field. In the case of PTC (Fig. 23a), only  $D_x$  component is nonzero, while for OTC (Fig. 23b) two components persist,  $D_x$  and  $D_y$ . Correspondingly, the resulted HHG spectra are presented as the logarithms of sum  $|D_x|^2 + |D_y|^2$ . Simultaneous presence of the second field leads to appearance of all even and odd orders of harmonics for both orientations. Calculations show the importance of orientation of  $E_\omega$  and  $E_{2\omega}$  vectors. For PTC, one can see the enhancement of cutoff position from 27th order to 41th–43th orders, while, for OTC, the cutoff position remains unchanged with some intensity modulations at the end of

the plateau. Changing of  $\varphi_0$  leads to the modulation of harmonic intensities at the cutoff region of plateau (in the case of  $\varphi_0 = \pi/2$  to  $\varphi_0 = 5\pi/6$  for PTC, Fig. 23a). In real experiments, this could be observed as the variation of cutoff. A similar minimum is observed for OTC (Fig. 23b,  $\varphi_0 = \pi/3$ ).



**Fig. 24.** [Fig. 7 in *Nanomaterials* 12, 4228. (2022)] HHG for SiC NP LIPs with chirped and chirp-free SCP and OTC. Panel (a) shows raw MCP images for SCP and OTC using 0.2 mm thick BBO crystal. Panels (b) presents profiles plots for corresponding images.

Fig. 24 presents the harmonic spectra during probing of SiC LIPs using chirp-free and chirped pulses. Green-filled profiles in panels (Fig. 24b) correspond to the chirp-free pulses with a pulse duration of 35 fs and  $I_{\omega} = 1.65 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$  in SCP and OTC configurations. We estimated the intensity of SH pulses to be  $I_{2\omega} \sim 9 \times 10^{12} \text{ Wcm}^{-2}$ . The most observable peculiarity is a strong reduction of cutoff position for the OTC pump. In the case of SiC NP LIP, it moved from 25H to 15–16H, despite relatively small SH intensity. The model calculations (Fig. 23b) for equal  $\omega$  and  $2\omega$  fields do not predict such behavior. Intensity ratios for model calculations were determined using the pulse energy and duration measurements for fundamental 800 nm and SH. Phase difference was not exactly measured, but instead was modeled the variations of HHG spectra using simplified model in the case of chirp-free pulses. In experiment, the reduction of cut-off was observed in the case of the chirp-free pulses. This process was not predicted even for equal  $\omega$  and  $2\omega$  intensities when the strongest mutual influence of two waves is expected. Some reduction of cut-off is predicted for the phase difference around  $\pi/3$ .

## CONCLUSIONS

Presented here theoretical studies are tightly connected with the data obtained in experiments and SFA-based theoretical calculations or direct numerical calculation with TDSE. Both ionization and HHG demonstrated the strength and flexibility of the SFA-based approach, while adequately reflecting the key characteristics of

experiments. In contrast, direct numerical solution of TDSE is still a sufficiently time-consuming procedure.

The main conclusions are:

1. The process of strong-field ionization in the laser irradiated diatomic molecule  $F_2$  compared to  $N_2$  and  $O_2$  and their counterpart atoms Ar and Xe, was considered within the framework of the velocity gauge version of conventional SFA. The adequate to existing experimental data description of the phenomenon of no suppression in the  $F_2$  ionization versus  $N_2$  and Ar was obtained.

2. Proton momenta obtained by reaction nanoscopy can be used as a characteristic for single nanoparticles and their clusters in an aerosol stream. It was demonstrated experimentally and confirmed by numerical calculations that cluster signals dominate over single nanoparticle signals at low intensities, offering a suitable explanation for discrepancies between previous experimental data on the electron emission cutoff from silica nanoparticles.

3. Surface of  $SiO_2$  nanoparticles irradiated with intensive short laser pulses demonstrates complex and unique molecular dynamics to form  $H_3^+/D_3^+$  ions. Results offer an unambiguous demonstration of the characteristic of nanoparticles as catalysts for exotic chemical reactions in intense femtosecond laser fields.

4. The detailed SFA calculations of HHG spectra for atomic LIPs, on examples of Li,  $Li^+$ , Al and  $Al^+$ , demonstrated a good agreement with experimental results. The role of singly charged ions in LIPs is explained from a microscopic point of view.

5. Presented generalization of Gaussian exact model GEX for a description of molecular HHG allowed fully analytical representation of SFA HHG. The peculiarities of HHG spectra due to the HOMO symmetry, including the polarization properties of harmonics around the minima region, were demonstrated in the case of  $H_2$  and  $H_2^+$  molecules.

6. The orthogonally-polarized pumping scheme with the fundamental radiation and its second harmonic was applied to study Cooper minimum (CM) in HHG spectra of Ar. The macroscopic control of CM by the phase matching or changing the gas jet positions was demonstrated.

7. Experimentally demonstrated and theoretically explained spectral control of HHG in a combination of two processes, resonance enhancement and quasi-phase-matching by variation of a number of plasma jets on the surface of the bulk target.

8. Two-color orthogonal pumping scheme with chirped pulses was used to control and tune HHG in carbide-containing LIPs, with SiC,  $B_4C$ , and  $Cr_3C_2$  nanoparticles. Theoretical SFA calculations explained the role of polarization orientations in pumping fields.

### **Acknowledgements:**

I would like to thank my supervisor Prof. Rashid Ganeev for the constant and invaluable support and guidance during more than five years of collaboration. Special thanks to Dr Ganjaboy Boltaev for his contribution to carrying out the joint experimental studies. I would like to acknowledge Dr Ilya Kulagin and Dr Vladimir Usachenko for their support in theoretical calculations. I thank Prof. Chunlei Guo (CIOMP, China) and Prof. Ali Alnaser (AUS, UAE) for allowing working with the experimental facilities in their laser laboratories. And last but not least, I would like to express special thanks to Prof. Bobomurat Ahmedov and his team at IFAR for allowing me to present the results of my PhD research at IFAR.

**“ТИҚХММИ” МИЛЛИЙ ТАДҚИҚОТ УНИВЕРСИТЕТИ ҲУЗУРИДАГИ  
ФУНДҲМЕНТАЛ ВА АМАЛИЙ ТАДҚИҚОТЛАР ИНСТИТУТИ  
ҲУЗУРИДАГИ ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ  
DSc.03/31.03.2022 T/FM.10.04 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

---

**ФУНДҲМЕНТАЛ ВА АМАЛИЙ ТАДҚИҚОТЛАР ИНСТИТУТИ**

**КИМ ВЯЧЕСЛАВ ВАЛЕНТИНОВИЧ**

**УЛТРАҚИСҚА ИМПУЛСЛАР ЁРДАМИДА ЛАЗЕР ПЛАЗМАЛАРДА  
ИОНЛАНИШ ВА ЮҚОРИ ТАРТИБЛИ ГАРМОНИК ҲОСИЛ  
БЎЛИШИНИ ЎРГАНИШ**

**01.04.02 – Назарий физика  
(физика-математика фанлари)**

**Эълон қилинган илмий ишлар бўйича диссертациясиз  
фалсафа доктори (PhD) илмий даражасини олиш учун  
ТАҚДИМНОМА**

**Тошкент – 2023**

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Олий таълим, фан ва инновациялар вазирлиги ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида В2023.2.PhD/FM856 рақами билан рўйхатга олинган.**

Тақдимнома “ТИҚХММИ” Миллий тадқиқот университети ҳузуридаги Фундаментал ва амалий тадқиқотлар институтида бажарилган.

Тақдимнома уч тилда (ўзбек, инглиз, рус (резюме)) Илмий кенгаш веб-саҳифаси ([www.ifar.uz](http://www.ifar.uz)), Миллий ахборот агентлиги веб-саҳифаси ([www.uza.uz](http://www.uza.uz)) ва «Зиёнет» таълим ахборот тармоғида ([www.ziynet.uz](http://www.ziynet.uz)) жойлаштирилган.

**Илмий раҳбар**

**Ганеев Рашид Аширович**

Физика-математика фанлари доктори, профессор  
Латвия университети, Рига, Латвия

Тақдимнома “ТИҚХММИ” Milliy tadqiqot universiteti huzuridagi Fundamental va amaliy tadqiqotlar instituti huzuridagi **DSc.03/31.03.2022.T/FM.10.04** raqamli Ilmiy kengashning 2023-yil “\_\_\_” \_\_\_\_\_ soat \_\_\_ daqiqa daqiqa majlisida bo‘lib o‘tadi. (Manzil: 100000, Toshkent shahri, Qori Niyoziy ko‘chasi 39-uy, Fundamental va amaliy tadqiqotlar instituti, 312- majlislar zali; tel.: 71 237-09-61.; e-mail: info@ifar.uz

Taqdimnoma bilan “ТИҚХММИ” Milliy tadqiqot universiteti huzuridagi Fundamental va amaliy tadqiqotlar instituti Axborot-resurs markazida tanishish mumkin (\_\_\_ raqami bilan ro‘yxatga olingan). (Manzil: 100000, Toshkent shahri, Qori Niyoziy ko‘chasi, 39-uy, Fundamental va amaliy tadqiqotlar instituti, kutubxonasi; tel.: 71 237-09-62.

Тақдимнома “ТИҚХММИ” Миллий тадқиқот университети ҳузуридаги Фундаментал ва амалий тадқиқотлар институти ҳузуридаги **DSc.03/31.03.2022.T/FM.10.04** рақамли Илмий кенгашнинг 2023-йил “\_\_\_” \_\_\_\_\_ соат \_\_\_ дақиқа дақиқа мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 100000, Тошкент шаҳри, Қори Ниёзий кўчаси 39-уй, Фундаментал ва амалий тадқиқотлар институти, 312- мажлислар зали; тел.: 71 237-09-61.; e-mail: info@ifar.uz

Тақдимнома билан “ТИҚХММИ” Миллий тадқиқот университети ҳузуридаги Фундаментал ва амалий тадқиқотлар институти Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (\_\_\_ рақами билан рўйхатга олинган). (Манзил: 100000, Тошкент шаҳри, Қори Ниёзий кўчаси, 39-уй, Фундаментал ва амалий тадқиқотлар институти, кутубxonasi; тел.: 71 237-09-62.

Тақдимнома 2023-йил “\_\_\_” \_\_\_\_\_ куни тарқатилди.  
(2023-йил “\_\_\_” \_\_\_\_\_ дақиқа дақиқа рақамли реестр баённомаси)

Б.Ж. Аҳмедов  
Илмий даражалар берувчи илмий  
кенгаш раиси ф.-м.ф.д., профессор

Э. Х. Каримбаев  
Илмий даражалар берувчи илмий  
кенгаш илмий котиби ф.-м.ф. бўйича PhD

## КИРИШ (тақдимот реферати)

**Мавзунинг долзарблиги ва зарурати.** Давомийлиги бир неча ўндан бир оптик циклгача бўлган тезкор ва ультрақисқа лазер импульслари манбаларини ишлаб чиқиш ёруғлик майдони интенсивлигини  $10^{14}$  дан  $10^{20}$  Вт см<sup>-2</sup> гача ошириш имконини берди. Бундай шароитда, лазер ёрдамида ҳосил қилинган кўп фотонли жараёнлар билан боғлиқ, остона усти ионизацияси, юқори гармоника генерацияси ва шу каби янги кучли майдон ҳодисалари юзага келади. Кучли лазер майдонларида турли материалларнинг ионлашиш ҳолати ва уни батафсил тушуниш фундаменталь қизиқишни уйғотади, чунки якка ионлашишнинг дастлабки жараёни уйғотувчи лазер майдонида квант тизимларнинг кейинги эволюцияси учун зарурий шартдир. Бундан ташқари, кўриб чиқиладиган кучли майдон жараёни фотокатализ ва нанозаррачаларнинг сирт фотохимияси каби соҳаларда асосий рол ўйнайди. Нанозаррачалар томонидан ёруғликнинг ютилиши электроннинг заррача юзасига адсорбцияланган молекулаларга ўтишига олиб келиши ва молекуляр реакцияларни бошлаши мумкин. Сирт фотохимиясининг микроскопик тафсилотлари асосан биологик тизимларга таъсирини аниқлайди. Масалан, нурланган металл нанозаррачалари саратон касаллиги тасвирини кўриш ва даволашда кенг қўлланилади, дори-дармонларни ўз ичига олган фаол молекулаларни термал назорат остида маҳаллий етказиб бериш ва аэрозолланган мезоғовакли диэлектрик нанозаррачалар респиратор симптомларни даволашда истиқболни намоён қилади. Когерент экстремал ультрабинафша (ЭУБ) нурланишининг самарали манбаларини ишлаб чиқиш оптиканинг фундаментал ва амалий эҳтиёжлари учун қизиқ бўлган яна бир муҳим муаммодир. Изотроп муҳитда (газлар ва лазер ёрдамида ҳосил қилинган плазма) ультрақисқа лазер импульсларининг юқори тартибли гармоника (ЮГГ)ларини ҳосил қилиш ЭУБ йўналишидаги уйғотувчи импульслар частотасини ўзгартиришнинг энг оддий ва ишончли усули ҳисобланади. ЮГГни яхшилаш усуллари турли параметрларни оптималлаштиришни ўз ичига олади, масалан, заррачалар зичлиги ва уйғонган ҳолат, уйғотувчи импульсларнинг интенсивлиги, қиздирувчи импульс энергия зичлиги ва бошқалар, бу жараённинг қулай шароитларини яратиш учун, фазаларнинг мос келмаслиги ЮГГ алмаштириш самарадорлигини чеклашда ҳал қилувчи рол ўйнамаса. Турли металллар, металл қотишмалари, инсуляторлар ва ярим ўтказгичлар абляция ва лазер ёрдамида ҳосил қилинган плазма (ЛХҚП) ларда ЮГГ билан таҳлил қилинди. Ушбу жараёнларни янада оптималлаштириш газ оқимларидан фойдаланган ҳолда ЮГГ олишда қўлланилмайдиган усулларни ўз ичига олади. ЛХҚПлар табиий равишда нисбатан катта агрегатларни (кластерлар, квант нукталари ва нанозаррачалар) ўз ичига олиши мумкин. Ягона гармониканинг

резонанс кучайиши ва модуляцияланган ЛХҚПнинг ўзига хос шартларини шакллантириш, гармониканинг турли гуруҳлари учун квазифазали мослашувга эришилганда, олдиндан танланган спектрал минтақада битта гармоника сигналини кучайтириш учун фойдаланиш мумкин. Ушбу усулларни битта тажрибада амалга ошириш қийин, чунки бу усулларга қўйиладиган талаблар бир-бирига зид бўлиши мумкин. Шунинг учун ЮГГни такомиллаштириш учун янги схемалар, материаллар, усуллар ва ёндашувларни излаш муҳим аҳамиятга эга. ЭУБ спектрал диапазонидаги когерент ёруғлик манбалари амалда нано ўлчовли ва хужайрадан ташқари тизимларнинг оптик тасвирини кўришни осонлаштириши, оптик литографияни яхшилаш ва реал вақтда атомлар, молекулалар ва наноструктуралар тизимлардаги электронларнинг ҳаракатини кузатиш имконини беради. Бундан ташқари, бундай нурланиш манбалари янги аналитик ёндашувни - ЭУБда резонанс спектроскопияни яратишга ҳисса қўшиши мумкин.

**Тадқиқотнинг халқаро контексти.** Дунё бўйлаб кўплаб етакчи университетлар ва тадқиқот марказлари кучли майдон ҳодисалари, хусусан, ионланиш, ЮГГ ва когерент ЭУБни қўллаш соҳасида атомлар, молекулалар ва аттосекунд вақт шкаласи билан материалларда ўта тез электрон динамикасини ўрганиш бўйича тадқиқотлар олиб бормоқда. Улар орасида Империял коллежида (Лондон, Англия) ЮГГ спектроскопияси гуруҳи, Нанолитография илғор тадқиқот марказида ЮГГ ва ЭУБ илмий гуруҳи (Амстердам, Нидерландия), Макс-Планк кўп тармоқли фанлар институти (Геттинген, Ш. Германия), ETH-Zurich даги наноструктуралар ва ультратез рентген нурлари фанлари гуруҳи (Цюрих, Швейцария), Чангчун оптика, физика ва нозик механика институтининг нозизиқли оптика гуруҳи (Чангчун, Хитой), Америка университетининг умумий тадқиқот маркази гуруҳи Шаржа (Шаржа, БАА), Мюнстер университети нанотехнологиялар маркази гуруҳи (Мюнстер, Германия), Токио университети (Токио, Япония) қошидаги нозизиқли оптика гуруҳи, Илғор технологиялар марказидаги лазер плазмаси бўлими гуруҳи (Индоре, Ҳиндистон), Миллий фан институти гуруҳи (Монреал, Канада) ва бошқалар.

#### **Мавзу бўйича тадқиқотнинг ҳозирги ҳолати.**

Когерент қисқа тўлқинли нурланиш фан ва техниканинг турли соҳаларида кенг қўламли фундаментал ва амалий тадқиқотлар учун тобора муҳим аҳамият касб этмоқда. Фемтосекунд ва аттосекунд давомийлик билан ЭУБ спектрал диапазонидаги монохроматик ва когерент ёруғлик импульслари оптик литографиянинг аниқлигини янада оширади, нано ўлчовли ва хужайра ости тизимларининг оптик тасвирини кўришни осонлаштиради, шунингдек атомлар, молекулалар ва наноструктуралар тизимларда электронларнинг ҳаракатини реал вақтда кузатиш имконини беради.

ЭУБ соҳасида когерент нурланишни ҳосил қилишнинг энг самарали усули ультрақисқа лазер импульслари ёрдамида ЮГГ ҳисобланади. Эътибор беринг, саксонинчи йилларнинг охиридан ҳозиргача энг кўп қўлланиладиган усул газлардаги ЮГГ эди [M. Ferray et al, “Multiple-harmonic conversion of 1064 nm radiation in rare gases,” J. Phys. B 21, L31–L36 (1988)]. Шу билан бирга, релятивистик ЮГГ, газларда ЮГГ ва қаттиқ жисмлар орқали тарқалиш жараёнида ЮГГ дан фойдаланиш асосий тўлқинни юқори гармоникага (яъни, кенг тарқалган инфрақизил лазерларнинг ўттизинчи тартибидан ошиб кетадиган гармоникага) айлантиришнинг нисбатан паст самарадорлиги билан чекланган; мос равишда, газлар ва сиртлардаги ЮГГ лар учун  $10^{-5}$  дан кам ва  $10^{-6}$  дан кам), бу катта ҳаракатлар ва молиявий харажатларга қарамай, сўнгги ўттиз йил ичида сезиларли даражада яхшиланмаган. Тўртинчи усул - ўтган асрнинг тўқсонинчи йилларида ривожланишини бошлаган ЮГГ учун лазер ёрдамида ҳосил қилинган плазма (ЛХҚП) дан фойдаланиш.

Юқори интенсив лазер импульси газ ёки плазма муҳитидан ўтганда, унинг атомлари ва ионлари тоқ гармоникаларни чиқаради. Лазер нурланиш тўлқин узунлиги  $\lambda$  учун нозикли муҳитнинг чиқишида  $\lambda$ ,  $\lambda/3$ ,  $\lambda/5$ ,  $\lambda/7$  ва ҳоказо компонентларнинг суперпозицияси кузатилади. Лазер нурланишининг гармониклари атомнинг (ёки ионнинг) ионланиши, электромагнит майдонда электроннинг тезлашиши ва гармониканинг ион ва эмиссияси билан кейинги рекомбинацияни ўз ичига олган уч босқичли жараён натижасида юзага келади. Бу жараён вақти-вақти билан электромагнит тўлқиннинг ҳар ярим циклида такрорланади. Энг юқори тартибли гармоникалар лазер импульсининг энг юқори интенсивлигида ионланиш momentiдаги электрон тезлашишига боғлиқ.

Уч босқичли ЮГГ нинг характерли хусусияти биринчи (паст тартибли) гармоникалар интенсивлигининг тез пасайиши, ундан кейин юқори тартибли гармоникаларнинг интенсивлиги бир-бирдан кам фарқ қиладиган узун плато ҳосил бўлиши ва ҳосил бўлган юқори тартибли гармоникаларнинг интенсивлигининг кескин пасайишидир (гармоник кесиш  $N_c$  деб аталади).  $N_c$  нинг ҳолати гармоника ҳосил бўлишда иштирок этувчи заррачаларнинг ионланиш потенциали  $I_i$  (газларда ЮГГ ҳолатида атомлар ва плазмадаги ЮГГ ҳолатида ионлар) энергияси ва фемтосекундли нурланишнинг интенсивлигига ва унинг тўлқин узунлигига боғлиқ, тезлаштирилган электронни белгилайдиган пондеромотив потенциал билан белгиланади. Асосий ЮГГ хусусиятларини ярим классик модел ёрдамида тавсифлаш мумкин [J. L. Krause et al, “High-order harmonic generation from atoms and ions in the high intensity regime,” Phys. Rev. Lett. 68, 3535-3537 (1992). P. B. Corkum, “Plasma perspective on strong-field multiphoton ionization,” Phys. Rev. Lett. 71, 1994–1997 (1993). M. Lewenstein et al, “Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields,” Phys. Rev. A 49,

2117-2125 (1994)], гарчи аниқроқ тавсиф изчил квант механик ишлов беришни талаб қилади.

Юқори қувватли ультрақисқа лазер импульсларининг атомлар ва ионлар билан ўзаро таъсирида содир бўладиган жараёнларни микроскопик кўриб чиқиш билан бир қаторда, модда орқали ўтиш эффектлари ва гуруҳ эффектлари каби макроскопик жараёнларни ҳам ҳисобга олиш керак. Бу эффектлар, биринчи навбатда, [D. B. Milošević, “Theoretical analysis of high-order harmonic generation from a coherent superposition of states,” J. Opt. Soc. Am. B 23, 308-317 (2006)] да келтирилган.

Юқори тартибли гармоникларни ҳосил қилиш ёндашувидан фойдаланган ҳолда плазма спектроскопиясида янги илғор назарий ва экспериментал усулларни жорий этиш (масалан, филаментлар, ўрта инфрақизил минтақадаги нурланиш манбалари, ташқи икки рангли дамлашлар, қаттиқ жисмли наноструктуралар, кластерлар ва пастки тартибли оптик ночизикликларнинг юқори қийматларига эга квант нуқталари ва бошқалар), илгари ишлаб чиқилган усуллар билан бир қаторда лазернинг абляцияланган намуналар билан ўзаро таъсири орқали материалларнинг физик ва оптик хусусиятларини чуқурроқ тушунишга имкон беради. Ушбу билимлар ЮГГ алмаштириш самарадорлигини янада ошириш ва амалий эҳтиёжлар учун изчил ЭУБнинг самарали манбаларини шакллантириш учун ҳам жуда муҳимдир.

Ушбу ёндашувни ишлаб чиқишда амалга оширилган мавзуларнинг хилма-хиллиги нуқтаи назаридан плазмадаги ЮГГ кўп панелли муаммо сифатида кўриб чиқилиши мумкин, жумладан лазернинг модда билан ўзаро таъсири, атом спектроскопияси, наноматериалларнинг синтези ва қўлланилиши, лазер физикаси, паст зичликдаги плазма тадқиқотлари, квант ва ночизикли оптика. Ушбу ёндашувнинг мақсадларидан келиб чиқадиган бўлсак, у юқоридаги соҳаларнинг синергияси туфайли материалларни ўрганишга қаратилган. Ушбу тадқиқотлар объектлари даврий жадвалнинг деярли барча радиоактив бўлмаган қаттиқ материаллари ҳисобланади. Газларда тез-тез ишлатиладиган ЮГГ бир нечта, одатда инерт газлар билан чекланганлигини унутманг. Бундан ташқари, ЛХҚПларда ЮГГ алмаштириш самарадорлиги, баъзи бир абляция қилинадиган нишонларда, газлардагидан каттароқ бўлиши мумкин. Абляцияланган материалларда ЮГГ спектроскопиясининг потенциали уни минглаб қаттиқ жисмларга (металллар, металлоидлар, яримўтказгичлар, диэлектриклар, йирик органик молекулалар, қотишмалар, кластерлар, квант нуқталари, нанозарралар, юпқа плёнкалар каби наноструктурали материалларда) қўллашни таклиф қилади. Шундай қилиб, ушбу ЮГГ усули янги ёндашувлардан фойдаланган ҳолда материалларни тадқиқ қилиш соҳаларини сезиларли даражада

кенгайтиради. Бу жараёни осонлаштириш учун турли назарий ёндашувларни ишлаб чиқиш талаб этилади.

Қаттиқ жисмларни лазер билан абляция қилиш жараёнида ҳосил бўлган плазмадан ЮГГ учун восита сифатида фойдаланиш жуда жозибали ва истиқболли ёндашувдир, чунки у плазма таркибий қисмларини турли усуллар билан таҳлил қилиш имконини берувчи афзалликларни амалга оширишга олиб келади. Плазма муҳити фемтосекунд импульслари улар орқали ўтганда ЮГГ ёрдамида ЭУБ минтақасида самарали когерент манбаларни яратиш учун турли хил имкониятларни тақдим этади. Кенгайтирилган ЛХҚПлардан фойдаланиш, атом ёки ион тизимларида, кластерлар, квант нуқталари ва плазма шаклланишидаги нанозаррачалар, ЛХҚПларни икки ва уч рангли дамлашдаги резонанслар, фазовий модуляцияланган плазма тузилмаларида энергия узатиш учун оптимал шароитларни яратиш ва ушбу ЮГГ ёндашувининг бошқа техник ва фундаментал афзалликлари ЭУБ ни юқори алмаштириш самарадорлигини кутишимизга имкон беради (20 эВ фотонлар учун  $\sim 10^{-4}$  гача [R. A. Ganeev et al, “Strong resonance enhancement of a single harmonic generated in extreme ultraviolet range,” Opt. Lett. 31, 1699-1701 (2006)]), булар бу каби когерент нурланиш манбаларнинг амалий қўлланишига олиб келиши мумкин. Газлардаги ЮГГга ўхшаб, плазма факелларидан гармоникалар аттосекунд вақт оралиғида ўзига хос вақтга боғлиқ хусусиятларга эга бўлиши мумкин, бу бир вақтнинг ўзида ультра қиска импульсларни яратиш ва гармоник эмиттерлар билан боғлиқ турли жараёнларни ташхислаш имконини беради [R. A. Ganeev, *High-Order Harmonics Generation in Plasmas: Resonance Processes, Quasi-Phase-Matching, and Nanostructures*, 270 pages, Springer (2022)]. Шундай қилиб, ушбу йўналишдаги кейинги қадамлар ЛХҚПларда ЮГГ жараёнига таъсир қилувчи турли механизмларни батафсил назарий кўриб чиқишни талаб қилади.

**Тадқиқот мавзусини муассасанинг илмий-тадқиқот фаолияти билан боғлиқлиги.** Ph.D. тадқиқотлари учун экспериментал натижалар Чангчун оптика, физика ва нозик механика институти (Хитой) ва Шаржа Америка университети (БАА) Common Research Facility тадқиқот муассасаларида олинди. Назарий ҳисоб-китоблар ва моделлаштириш симуляциялари Чангчун оптика, физика ва нозик механика институтида (Хитой), Шаржа Америка университетида (БАА), Латвия университетида (Латвия) ҳамда Германия, Япония ва Россиянинг турли университетларининг симуляция гуруҳлари билан ҳамкорликда амалга оширилди.

**Тадқиқот ишининг мақсади** ультрақиска лазер импульслари ёрдамида лазер ёрдамида ҳосил қилинган плазма ва газларда кучли майдон ионланиши ва юқори тартибли гармоника ҳосил бўлишини назарий ва экспериментал жиҳатдан ўрганишдир. Резонанс кучайтирилган ва квазифазавий мослашиш (КФМ)

гармоникалар эмиссиясига эришиш учун лазерли плазмаларнинг бир ва икки рангли дамлашлар ёрдамида юқори тартибли гармоникаларни яратишнинг назарий ва экспериментал таҳлили ҳисобланади.

#### **Тадқиқотнинг вазифалари қуйидагилардан иборат:**

Қисқа ва ультрақисқа лазер импульслари билан нурлантирилганда молекулаларда нанозаррачалар юзасида кучли майдон ионланиш динамикасини ўрганиш;

Газлар ва лазер ёрдамида ҳосил қилинган плазмаларнинг юқори тартибли ночизиқли ҳоссаларини тадқиқ қилиш;

Резонанс кучайган ЮГГ ва кўп қатламли плазмаларни қўллаш билан спектрал тартибини ўзгартириш жараёнларини ўрганиш;

Икки рангли дамлаш схемалари ва чирпланган лазер импульсларидан фойдаланган ҳолда ЮГГ механизмини тушуниш;

ЮГГ учун нанозаррачалар билан бойитилган лазер ёрдамида ҳосил қилинган факелларни қўллаш.

**Тадқиқот объекти** - оддий металл ва мураккаб молекуляр нишонлардан лазер ёрдамида ҳосил қилинган плазмалар, нанозаррачаларни ўз ичига олган плазмалар ва газ оқимлари.

**Тадқиқот предмети** – нишон материалларининг парвоз вақти спектрларининг хоссалари ва хусусиятлари, юқори тартибли ночизиқли оптик хоссалари ва ҳосил бўлган юқори тартибли гармоникаларнинг спектрал хусусиятлари ҳисобланади.

**Тадқиқот усуллари**га қуйидаги ҳам назарий, ҳам экспериментал усуллар киради. Назарий усуллар кучли майдон яқинлашуви ва вақтга боғлиқ Шредингер тенгламаларининг сонли интеграцияси доирасида олинган аналитик моделлар билан симуляцияни ўз ичига олади. Экспериментал усуллар газ оқимларини зондлаш ёки лазер импульсларини лазер ёрдамида ҳосил қилинган плазмаларни юқори вакуум шароитида қисқа ва ультрақисқа зондлаш импульслари билан қиздириш орқали шакллантиришни ўз ичига олади. Ион рентабеллиги ва импульс спектроскопияси реакция наноскопияси деб номланувчи кенгайтирилган парвоз вақти техникаси ёрдамида йиғилади. ЮГГ эмиссияси ЭУБ спектроскопия усули ёрдамида қайд этилади.

#### **Тадқиқотнинг илмий янгилиги**

Реакция наноскопияси ёрдамида олинган протон моментлари битта нанозаррачалар ва уларнинг аерозол оқимидаги кластерларига хос эканлиги кўрсатилди. Биринчи марта паст интенсивликда кластер сигналлари битта нанозаррача сигналлари устидан устунлик қилиши намойиш этилди, бу кремний диоксиди нанозаррачаларидан электрон эмиссия чегараси бўйича олдинги

экспериментал маълумотлар ўртасидаги номувофиқликлар учун мос тушунтиришни таклиф қилади.

Биринчи марта,  $\text{SiO}_2$  нанозаррачалар юзасида адсорбцияланган  $\text{H}^{3+}/\text{D}^{3+}$  ионларини ҳосил қилувчи, сув/оғир сув молекулалари томонидан ўтадиган мураккаб ва ноёб молекуляр динамикани очиб берувчи натижалар тақдим этилди. Натижалар интенсив фемтосекундли лазер майдонларида экзотик кимёвий реакциялар учун катализатор сифатида нанозаррачаларнинг характеристикасининг аниқ намоёишини таклиф қилади.

Биринчи марта,  $\text{Li}$ ,  $\text{Li}^+$  ларнинг ЛХҚПлари учун ЮГГ спектрларининг кучли майдон яқинлашуви (КМЯ) усули ёрдамида батафсил ҳисоб-китоблари амалга оширилди, бу экспериментал натижалар билан яхши мос келиши аниқланди ва иккинчи энг юқори ионланиш энергиясига эга бўлган  $\text{Li}^+$  ионларининг ЮГГ чегарасининг гармоник кесишидаги роли ҳақида тўғри хулосалар берилди.

Алюминий  $\text{Al}$  ЛХҚП лари учун биринчи марта ЭУБ диапазонида кучли ионли эмиссия линияларининг мавжудлиги битта бир-бирига яқин гармониканинг чиқишига таъсир қилмаслиги кўрсатилди.  $\text{Al}$  нанозаррача ( $\text{N}_3$ ) лари плазмаси мисолида гармоника чиқишининг 5 баробар ўсиши кўрсатилди. КМЯ ҳисоб-китоблари тақдим этилди ва гармоник кесиш  $\text{Al}^+$  эмас, балки  $\text{Al}$  нейтрал атомларининг иштироки билан боғлиқлиги кўрсатилди.

ЮГГ тавсифлаш учун Гаусс аниқ моделини (ГАМ) умумлаштириш шакллантирилди, бу ЮГГ учун КМЯ ни молекулалар учун доволон усулидан фойдаланмасдан тўлиқ аналитик кўрсатиш имконини берди. Энг юқори ишғол қилинган молекуляр орбитал (НОМО) симметриясининг ЮГГ спектрларининг ўзига хос хусусиятларига, шу жумладан минимал минтақа атрофидаги гармоникаларнинг қутбланиш хусусиятларига аниқ таъсири  $\text{N}_2$  ва  $\text{N}_2^+$  молекулалари мисолида кўрсатилди.

Ар газининг 1030 нм, 35 фс лазер импульслари билан ўзаро таъсирида ва асосий нурланишнинг ортогонал-поляризацияланган майдонларини қўллашда ҳосил бўлган ЮГГ спектрларидаги Купер минимуми (КМ) ўзгаришлари ва унинг иккинчи гармоникаси аниқланган.

$\text{Mo}$  ЛХҚПда ЮГГ пайтида 32 нм яқинида гармониканинг кучайиши ҳам рақамли, ҳам экспериментал равишда таҳлил қилинди.

Резонанс кучайиши ва квазифазали мослашувни иккала жараённинг комбинацияси билан таққослаш назарий ва экспериментал жиҳатдан тақдим этилган ва ўрганилган.

Биринчи марта,  $\text{SiC}$ ,  $\text{B}_4\text{C}$  и  $\text{Cr}_3\text{C}_2$  каби карбид ўз ичига олган нанозаррачалар ЛХҚПлари, битта рангли дамлаш ва чирпланган ва чирпланмаган импульсларга эга ортогонал қутбланган икки рангли дамлаш

давомида юқори тартибли гармоникаларни яратиш учун восита сифатида қўллаган ҳолда тадқиқот натижалари тақдим этилган. Назарий КМЯ ҳисоб-китоблари дамлаш майдонларининг кутбланиш йўналишининг ролини кўрсатди.

**Ишнинг амалий натижалари.** Назарий ва экспериментал таҳлил натижалари Шаржа Америка университетида (БАА) ЮГГ қурилмасини лойиҳалаштиришни такомиллаштиришда фойдаланилган. ЮГГ ҳисоб-китоблари ва экспериментал маълумотларни қайта ишлаш учун турли хил кодлар ишлаб чиқилган ва ҳозирда Чангчун Оптика, физика ва нозик механика институти (Хитой), Америка Шаржа университети (БАА) тадқиқот гуруҳларида ва Латвия университетининг (Латвия) ночизиқли оптика лабораторияларида фаол қўлланилмоқда.

**Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги** улар замонавий ҳисоблаш ва экспериментал усуллардан фойдаланган ҳолда олинганлиги билан тасдиқланади. Натижаларнинг ишончлилиги, шунингдек, олинган натижаларнинг экспериментал маълумотларга мос келишига асосланади. Бундан ташқари, олинган натижаларнинг ишончлилигини янада таъкидлаш учун номзоднинг барча мақолалари, илмий ишлари ночизиқли оптика соҳасидаги мутахассислар томонидан кўриб чиқилган ва Q1 ва Q2 кватилларига тегишли бўлган юқори рейтингли журналларда нашр этилган.

**Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.** Кучли майдоннинг ионланиш ҳодисаларини ўрганишга бағишланган тадқиқотнинг назарий ва экспериментал натижалари ноанъанавий усуллар билан ишлаб чиқариладиган экзотик молекуляр объектларга йўл очадиган нанозаррачаларнинг фотокатализ ва сирт фотохимёсини ривожлантиришга ёрдам беради. ЮГГга бағишланган тадқиқот натижалари юқори тартибли ночизиқли оптик жараёнларни яхшироқ тушунишга ёрдам беради ва ЭУБ спектрал диапазонида когерент ёруғлик манбаларини ишлаб чиқишда амалий ёрдам беради. Ушбу иш нано-миқёсдаги ва хужайра ости тизимларини оптик тасвирини кўриш, оптик литография ва атомлар, молекулалар ва наноструктурали тизимлардаги электронлар ҳаракатини аттосекунд вақт оралиғида кузатиш учун муҳимдир.

#### **Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши.**

Тақдим этилган тадқиқотнинг асосий амалиёти назарий натижалар, эксперимент дизайни, схемалар ва хулосаларни қўллаш, шунингдек, юқори импакт факторли журналларда чоп этилган 50 га яқин тадқиқот ишларидан иқтибос келтирилган. Жумладан – ЮГГ спектрида Купер минимумини назорат қилишда 4 та (Т.-Ф. Jiang, J. Phys. B 55, 075601; G.S. Boltaev, M. Iqbal, N.A. Abbasi et al, Sci. Rep. 11, 5534; K.M. Dorney, T. Fan, Q.L.D. Nguyen et. al, Optics Express 29, 38119; R. Rajpoot, A.R. Holkundkar, J.N. Bandyopadhyay, J. Phys. B 53, 205404),

нанозаррачалар сиртларида аномал  $H_3^+$  катионлари шаклланиши бўйича 5 та (J. Wang, Q. Qu, F. Sun, et al, Optics Express, 31, 9678; V. Ialyshev, G. Boltaev, M Iqbal et al, ACS Omega 7, 28182; H. Li, X. Gong, H. Ni, Journal of Physical Chemistry Letters 13, 5881 и др.), молибден сиртида хосил килинган плазмада ЮГГ резонанс кучайиши – 8 та (M. Venkatesh, V.V. Kim, G.S. Boltaev, et al, International Journal of Molecular Sciences 24, 6540; W. Fu, Y.H. Lai, W. Li, Optics Express 30, 47315 и др.), молекуляр газларда ионизация камайиши бўйича 15 та (J.E. Szekely, T. Seideman, Physical Review Letters, 129, 183201; M.C. Stroe, M. Fidirig, Optik, 224, 165612; Y. Chen, B. Zhang, J. Phys. B 45, 215601 и др.), турли лазер плазмаларида ва аргон газида ЮГГ таққослаш бўйича тадқиқотларда 9 та (R.A. Ganeev, Applied Physics B 129, 17; V.V. Kim, I.A. Shuklov, A.A. Mardini, et al, Nanomaterials 12, 1264; D. Goldberger, D. Schmidt, J. Barolak, Optics Express, 29, 32474).

**Тадқиқот натижаларини нашр этиш.** PhD диссертациясининг илмий тадқиқот натижалари Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссияси томонидан фалсафа фани доктори (PhD) илмий даражасининг асосий илмий натижаларини чоп этиш учун тавсия этилган нуфузли Q1/Q2 квантиллар илмий журналларида чоп этилган 15 та илмий мақолаларда келтирилган ва Web of Science илмий маълумотлар базасида кўрсатилган.

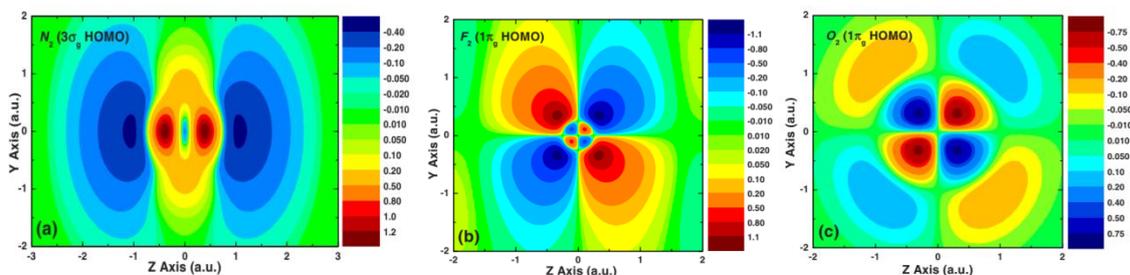
## ИШНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

**Кириш.** Бу ерда ёритилган натижалар фалсафа фанлари доктори (PhD)га номзод ва унинг ҳаммуаллифлари Q1/Q2 кватриллари илмий журналларида 10 та илмий мақолада акс этган. Ушбу нашрлар бўйича кўпгина назарий ҳисоб-китоблар ва экспериментал маълумотлар Ўзбекистон, Хитой Халқ Республикаси, Бирлашган Араб Амирликлари ва Латвия илмий институтлари ва университетларида ишлаган 5 йиллик давр мобайнида тўпланган. Илмий нашрлар мавзулари кучли майдонли ионланиш ва юқори тартибли гармониклар(ЮГГ) ни ҳосил қилиш каби асосий кучли ҳодисаларни қамраб олади. Ионизация ва ЮГГ турли хил муҳитларда, масалан, атомик инерт (Ar, Xe), молекуляр газлар ( $N_2$ ,  $H_2$ ,  $F_2$ ,  $O_2$  ва бошқалар) ва қаттиқ жисмлар, турли хил молекуляр ва структуравий таркибга эга бўлган молекулалар (металллар, металл карбидлар, нанозаррачалар ўз ичига олган материаллар) юзасида ҳосил бўлган лазер ёрдамида ҳосил қилинган плазма (ЛХҚП)ларда ўрганилди. Ультрақисқа фемтосекундли лазер импульслари асосий зондлаш воситаси сифатида импульс энергияси, давомийлиги, чирпнинг мавжудлиги ва миқдори каби параметрлари, икки рангли дамлаш конфигурациясини қўллаш билан бирга созланди. Ушбу бобда оддий диатомик молекулалардан ионланишни бостириш ҳодисаларининг [Phys. Rev. A 79, 023415 (2009)], нанозаррачалар ва кластерлар юзаларида ионланиш [ACS Photonics 7, 1885-1892 (2020)],  $H_3^+$  ионларининг шаклланиши [Nat Commun 12, 3839 (2021)], оддий металллар (Li ва Al) сиртида ЛХҚП ларда ЮГГ [Opt. Lett. 44, 3693-3696 (2019); J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 245601 (2019)],  $H_2$ ,  $H_2^+$  каби икки атомли газларда ЮГГ [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 155405 (2020)], ЮГГ пайтида интерференция жараёни [New J. Phys. 22, 083031 (2020)], гармоникларни кучайтиришда резонанс таъсирида намоён бўладиган жараёнлар [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 195401 (2020)], гармоникаларнинг квазифазали мослашуви [Opt. Continuum 1, 1098-1116 (2022)] ва нанозаррачаларни ўз ичига олган ЛХҚПларда ЮГГ [Nanomaterials 12, 4228 (2022)] назарий ва экспериментал тадқиқотлари тақдим этилган.

**1-боб. Гомоядровий диатомик молекулаларда кучли майдон ионлашуви, нанозаррачалар юзасида реакция наноскопия техникаси.** Ушбу бобда ультрақисқа фемтосекунд импульслари нурланиши таъсирида ионланиш жараёнларининг назарий ва экспериментал тадқиқотлари натижалари келтирилган. Биринчи ишда [Phys. Rev. A 79, 023415 (2009)] икки атомли  $F_2$  молекуласини унга атомар ўхшаш ва ионлашиш потенциали деярли бир хил бўлган Ag билан солиштириганда лазер билан нурлантирилганда кучли майдон ионлашиши бўйича тажрибаларда кузатилган ионлашишни бостиришнинг сирли ҳодисасини назарий жиҳатдан кўриб чиқишга бағишланган, молекуляр тўлқин

функциясининг икки марказли табиати туфайли лазер майдони ёрдамида ҳосил бўлган ички молекуляр интерференция жараёнлари аниқ аломатлари эса бир неча бор кучайган тарзда намоён бўлади, масалан  $N_2$  учун  $Ar$  билан солиштирилганда ва/ёки кучли бостирилган, масалан,  $O_2$  учун  $Xe$  ионизация билан солиштирилганда, лазер билан нурланган диатомик молекулалар учун уларнинг "компаньонлари" ёки деярли бир хил боғланиш энергиясига эга бўлган атом турларининг аналоглари билан солиштирилганда кузатилади. Тақдим этилган ишда ҳисоб-китоблар учун молекуляр кучли яқинлашиш усулининг спидометрик формуласидан (СМ КМЯ) фойдаланилган. КМЯ нинг муқобил формуласига асосланган ёндашувни ишлаб чиқиш сабабларидан бири ишлаб чиқилган кучли майдон молекуляр орбитал Аммосов-Делоне-Краинов (МО-АДК) назарияси доирасида тегишли талқинни ололмаслиги эди, бу ҳам туннел ионланишининг АДК модели деб аталадиган нуқтаи назарда  $F_2$  ва  $O_2$  ионлашиши учун юқори даражали бостиришга олиб келди. Бу ёндашувга асосан такомиллаштирилган ван Леувен-Баерендс ЛБ-молекуляр боғланиш потенциалидан фойдаланган ҳолда бошланғич лазерсиз молекуляр ҳолатларнинг рақамли таркиби учун қўлланиладиган зичлик-функционал назария ЗФН усулидан фойдаланади, бу ҳам алмашинув ҳамда корреляцион локал спин-зичлик яқинлашиш (ЛСЗЯ) потенциалини ўз ичига олади, шунингдек молекуляр ёки атом валент қобикларини ва мос боғланиш энергиялари тўғри акс эттирувчи бошланғич лазерсиз тўлқин функцияни шакллантиришга имкон беради. Ягона фаол электрон (ЯФЭ) асосидаги кўриб чиқиладиган лазер таъсиридаги тизимнинг маълум хусусиятлари ҳақидаги маълумот  $n$  - чи дискрет ҳолатнинг бошланғич лазерсиз тўлқин функциясининг ионланиш потенциали ва Фурье алмаштириши шаклида мавжуд.  $F_2$ ,  $N_2$  ва  $O_2$  гомоядровий диатомик молекулалари ва уларнинг атомар аналоглари  $Ar$  ва  $Xe$  лазер билан нурлантирилганда бошланғич дискрет ҳолатлари яхши ажратилган дискрет боғланиш энергияси ва тегишли тўлқин функцияларининг валентлик қобиғи тўплами билан яқинлаштирилди, бунда сонли усулда тузилган Gaussian-03 квант кимёсининг стандарт дастурлари қўлланилди. Хусусан, бошланғич лазерсиз умумий молекуляр ва/ёки атом тўлқин функцияси ҳозирда стандарт Гаусс асослари тўплами (ГАТ) ёрдамида тузилган ва  $sp$ -типидаги орбиталларни аралаштиришдан фойдаланган ҳолда ўзгартирилган ва ЛБ-молекулалараро боғланиш потенциали билан қўлланиладиган ЗФН ҳисоблаш усули қўлланилган.  $N_2$ ,  $O_2$  ва  $F_2$  учун сонли тузилган молекуляр тўлқин функцияларига мос келадиган ва молекуляр боғланиш энергияларининг аниқ қийматларига олиб келадиган НОМО импульс фазосида 1-расмда келтирилган. Хусусан,  $N_2$  да ҳисобланган  $3\sigma_g$  НОМО да 1а-расмда ядролараро ўқ бўйлаб чизилган электрон импульс тақсимоти яхши кўринадиган ва ядролараро ўққа перпендикуляр бўлган фазовий

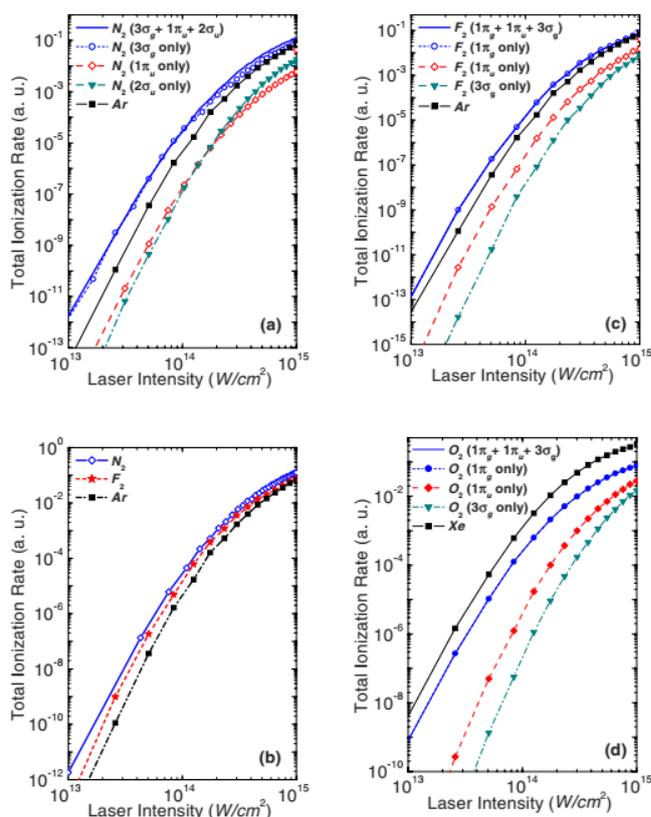
йўналиш бўйлаб сезиларли даражада чўзилган учта яхши ажратилган минтақадан иборат. СМ КМЯ ҳисоблаш натижалари, гомоядровий молекуляр валентлик қобикларининг қўлланиладиган ЗФНга асосланган рақамли таркибининг долзарблигининг мисоли сифатида диатомиклар, ҳодиса лазер майдонининг интенсивлигига қараб лаҳзали молекуляр ионланиш тезлиги учун 2-расмда кўрсатилган. Хусусан, 2-расмда  $N_2$  ва  $Ar$  билан солиштирганда  $N_2$  нинг ионланишининг бостирилмаслиги, шунингдек,  $Ar$  га нисбатан  $F_2$  нинг ионланишининг бостирилмаслиги кўрсатилган. Шундай қилиб, тақдим этилган ЗФН КМЯ мулоҳазасига кўра,  $F_2$  нинг  $Ar$  га қараганда ионлашганлиги, тажриба маълумотларига кўра кўпроқ эканлигини исботлади, гарчи олдинги муқобил кучли майдон мулоҳазаларининг тегишли натижаларига зид бўлса-да, уларнинг барчаси  $F_2$  нинг  $Ar$  га нисбатан ионланишида юқори бостиришни башорат қилади. Айни пайтда, 2б-расм  $O_2$  нинг  $Xe$  га нисбатан ионланишида юқори бостиришни таклиф қилади, бу ҳам тегишли тажрибалар билан яхши мос келади. Бундан ташқари, 2-расмдаги натижалар шунни кўрсатадики, кўриб чиқиладиган диатомикларнинг ҳар бирининг ионланиши ҳар доим уларнинг НОМО сининг ионлашуви ҳиссасига тўғри келади, шунинг учун ички молекуляр қобикларнинг тегишли ҳиссаси ҳар доим сезиларли даражада кичик бўлади. Шунини ҳам таъкидлаш жоизки, кўриб чиқиладиган бутун лазер интенсивлиги доирасида  $O_2$  ва  $F_2$  даги  $3\sigma_g$  ички қобикнинг ионланишининг нисбий ҳиссаси ички  $1\pi_g$  қобикнинг ионланиши билан солиштирганда сезиларли даражада бостирилади.



**1-расм.** [Phys. Rev. A 79, 023415 (2009) да 2-расм] Контур импульс фазосида молекуляр тўлқин функцияларининг  $\Phi(r, R_0)$  планар кесмаларини ва гомоядровий икки атомли боғланишларда НОМО учун ҳисобланган тегишли молекуляр тўлқин функцияларининг Фурье алмаштиришини кўрсатади. диатомик :  $N_2$  1а панелда  $3\sigma_g$ ,  $F_2$  2б панелда  $1\pi_g$  ва  $O_2$  2с панелда  $1\pi_g$ . Ядролараро молекуляр ўқ горизонтал йўналишда жойлашган бўлиши керак.

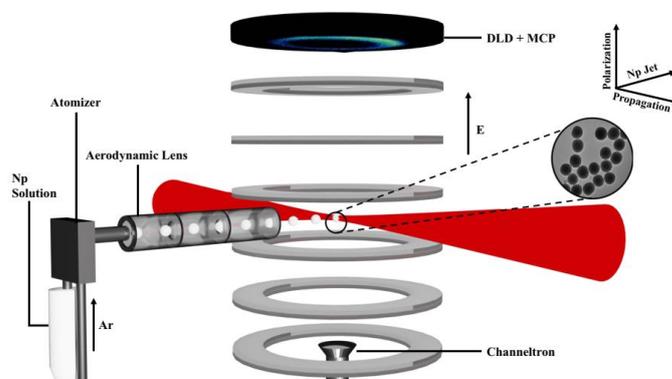
[Phys. Rev. A 79, 023415 (2009)] натижалари бўйича хулосада, лазер билан нурланган икки атомли молекула  $F_2$  да кучли майдонли ионланиш жараёни бошқа гомоядроларга нисбатан диатомик  $N_2$  ва  $O_2$  ва уларнинг ўхшаш атомлари  $Ar$  ва  $Xe$  мос равишда назарий жиҳатдан кўриб чиқилди ва анъанавий кучли майдон яқинлашуви КМЯ нинг спидометрик СМ версияси доирасида рақамли

ўрганилди ва  $N_2$  ва  $Ar$  га қараганда  $F_2$  ионланишида бостирилишнинг йўқлиги феномени етарли даражада тасвирланган. Аниқроқ айтганда, ҳозирги вақтда қўлланиладиган СМ КМЯ ёндашуви асосан ионизация остида лазерсиз бошланғич молекуляр ва/ёки атом ҳолатининг рақамли таркибини ўз ичига олган муқобил ва аниқроқ ЗФН усулига асосланган. Бундан ташқари, ишлаб чиқилган рақамли усуллар қисман қўлланилди ва кейинги ишларда [Opt. Lett. 44, 3693-3696 (2019); J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 245601 (2019); J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 155405 (2020); Nanomaterials 12, 4228. (2022)] турли муҳитларда юқори тартибли гармоникларни ҳосил қилишнинг назарий ҳисоб-китоблари учун кенгайтирилди. Ушбу бобда тақдим этилган кейинги иккита асар [ACS Photonics 7, 1885-1892 (2020) ва Nat Commun 12, 3839 (2021)] ультрақисқа фемтосекундли лазер импульсларининг нишонлар билан таъсирлашувида ион ва электрон ўзаро таъсир маҳсулотлари учун импульс тақсимооти харитасини рўйхатга олиш имконини берувчи, парвоз вақти (ПВ) техникасининг кейинги эволюциясини ифодаловчи мураккаб реакция наноскопия техникасининг экспериментал ва назарий натижаларини тақдим этади.



**2-расм** . [Phys. Rev. A 79, 023415 (2009) мақолада 3-расм] Лазер билан нурланган диатомик боғлар  $N_2$  3а ва 3б панеллар,  $F_2$  3б ва 3с панеллар ва  $O_2$  3д панел учун молекуляр ионланиш тезлиги Ти:сафир лазер нурланишининг интенсивлигига нисбатан чизилган. ядролараро молекуляр ўқи лазер майдонининг поларизацияси бўйлаб йўналган деб фараз қилинди. Диатомларнинг ҳар бири учун НОМО ва ички молекуляр валентлик қобиқларининг умумий ҳиссасига (яъни,  $N_2$  да  $1\pi_u$  ва  $2\sigma_u$  ёки  $F_2$  ва  $O_2$  да  $1\pi_u$  ва  $3\sigma_g$ ) мос келадиган умумий ионланиш тезлиги қалин қаттиқ чизик, , шунингдек, тақдим этилган кўриб чиқиладиган ягона ташқи ёки ички молекуляр валентлик қобиғидан алоҳида ҳисса қўшадиган тегишли қисман ионланиш тезлиги нозик чизиклар ҳисобланади. Тегишли ўхшаш атомлар ионлашуви натижасида ҳосил бўлган ҳисобланган атом ионлашиш тезлиги тўлдирилган квадратлар билан кўрсатилган.

3-расмда наноскоп реакцияси учун экспериментал тартиб кўрсатилган, аэродинамик линзалар ёрдамида таркибида нанозаррачалар бўлган аэрозол оқими ҳосил бўлади. Шаржа Америка университетида (ШАУ) марказий тўлқин узунлиги 1030 нм ва такрорланиш частотаси 150 кГц, импульс давомийлиги 40 фс бўлган янги юқори қувватли нуртолага лазер кучайтиргич асосланган фемтосекундли тизимига (AFS-UFFL-300-2000-1030- 300 from Active Fiber Systems GmbH) фойдаланиш орқали ультратезкор жараёнларни ўрганиш учун дунёда ноёб имкониятни яратади. Лазер нурунинг нанозаррачалар билан ўзаро таъсири локал майдонни ва нанофокуслашни кучайтиради. Интенсив лазер импульслари билан ўзаро таъсир қилиш орқали ёруғликдан келиб чиқадиган эмиссияни назорат қилиш ва субтўлқин узунлиги фазосида ва аттосекунд вақт шкаласида электронларни тезлаштиришга эришиш мумкин. Ўртача интенсивликда ( $\sim 10^{14}$  Втсм<sup>-2</sup>) электрон тезлашишига ҳисса қўшадиган турли эффектлар топилди. Буларга яқин майдонларда электронларнинг эластик орқага сочилиши, шунингдек, локал ва нолокал заряд ўзаро таъсирлари киради. Юқори интенсивликда ионларнинг лазер тезлашиши ва плазма динамикаси аэрозолланган нанозаррачалар ёрдамида текширилиши мумкин. Плазма ҳосил бўлмасдан етарлича паст интенсивлик учун нуқта проекцияси концепциясига асосланиб, реакция



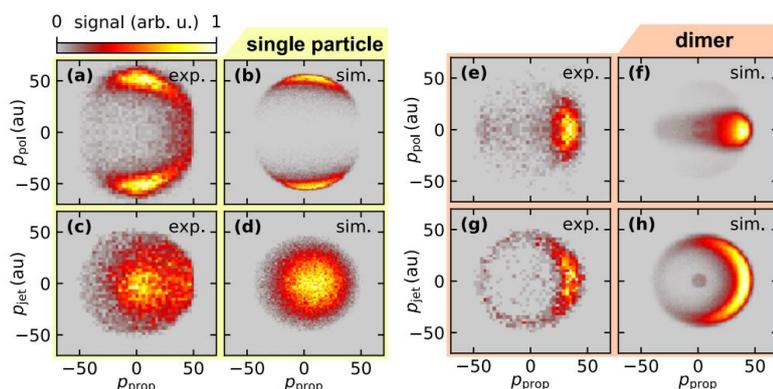
**3-расм.** [Nat. Commun. 12, 3839 (2021) да 5-расм] Реакция наноскопияси. Ташувчи газ сифатида Ar ёрдамида чанглатгич томонидан пуркаладиган нанозаррача эритмаси (Np эритмаси) кўрсатилган экспериментал схеманинг расми келтирилган. Кейин аэрозол аэродинамик линзалар ёрдамида коллимация қилинади, бу эса ўта юқори вакуум камерасига киритиладиган оқимни ҳосил қилади. Нанозаррачалар доимий майдон (E) спектрометрнинг марказидаги лазер майдони билан ўзаро таъсир қилади. Ўзаро таъсир натижасида ҳосил бўлган ионлар микроканалли пластинка (МКП) ва кечикиш чизиғи детектори (КЧД) томон тезлашади. Электронлар каналтрон томон тезлашади ва нанозаррачалар ва фон ионларини ажратиш учун ишлатилади. Қўшимча расмда экспериментларда ишлатиладиган кремний диоксиди нанозаррачалари (NanoComposix) сканерловчи электрон микроскоп (СЕМ) тасвири кўрсатилган.

наноскопияси юқори фазовий аниқликда аерозолланган наноструктуралар юзасида фемтосекунд лазер таъсирида фотохимёвий жараёнларни ўрганиш учун эшикни очади. Ягона сферик нанозаррачалардаги депротонлаш реакцияларининг нисбий реакция ҳосилдорлигини сиртда нанометр аниқлик билан хариталаш мумкинлиги кўрсатилди.

Нанозаррачалар кўпинча мос эритувчиларда коллоид суспензиялар сифатида тайёрланади. Эритмада заррачаларнинг тўпланиш тенденцияси турли омилларга боғлиқ ва уларни назорат қилиш мумкин. Бундан ташқари, буғланиш босқичида томчилар кластер шаклланишига олиб келадиган бир нечта битта заррачаларни ўз ичига олиши мумкин. Аерозол манбаларида битта заррачалар ва уларнинг кластерлари нурланиши одатий ҳолдир. Ушбу [ACS Photonics 7, 1885-1892 (2020)] ишда, лазер ёрдамида ҳосил бўлган ионларнинг бурчак тақсимотига яқин майдонларнинг нуқта проекцияси харитаси, якка заррачалар ва уларнинг кластерларидан реакция чиқиши ўртасида *in situ* фарқини амалга ошириш учун фойдаланилган. Якка нанозаррача анча диполяр майдон тақсимотига эга бўлса-да, димер атрофидаги майдон нақшлари мураккаброқ, катталиги каттароқ ва кучли йўналишга боғлиқ. Яқин майдонлардаги бу фарқлар нанозаррачалар юзасининг кучли майдон ионланиши ва сиртга бириктирилган молекулаларнинг боғланишининг узилиши каби ночизикли жараёнларга сезиларли даражада таъсир қилади. Реакция наноскопиясидан фойдаланиб, протон эмиссияси кремний диоксиди нанозарралари юзасида молекуляр диссоциациядан ўрганилиб, протон моментидаги аниқ фарқлар якка нанозаррачалар ва уларнинг кластерларидаги реакция ҳосилдорликларини фарқлаш имконини беради деган хулосага келди. Кенгайтирилган яқин майдоннинг аниқ шаклига сезгирлиги туфайли реакция наноскопиясини заррачаларни *in situ* тавсифлаш усули сифатида кориб чиқиш мумкин.

Диаметри 300 нм бўлган кремний диоксиди сфераси ва димерлари атрофидаги яқин майдон тақсимоти FDTD симуляциялари (Lumerical 2020a, FDTD Solver 8.23.2194 версияси) ёрдамида 5 нм қадамли доимий панжарада олинган. Сиртларда статик мусбат зарядлар ҳосил бўлиш эҳтимоли тақсимоти АДҚ типигади квазистатик ионланиш тезлиги бўйича Гаусс лазер импульси учун вақтинчалик интенсивлик конвертининг ярми максимал кенглиги 40 фс да ҳисобланади. Симуляцияларда 10,2 эВ кремний диоксиди нанозарралари учун ионланиш потенциалидан фойдаланилган. Протонларнинг сирт яқинида тақсимланиши радиал Гаусс тақсимоти ( $r_0 = 150$  нм,  $\sigma_r = 30$  нм) ва қувват қонуни ( $I^{13}$ ) деб ҳисобланади. Гаусс тақсимоти молекулаларнинг нанозаррачалар юзаси яқинидаги фазовий тақсимотини моделлаштиради, куч қонуни эса мослаштирилган протон ҳосил бўлишининг интенсивлигига боғлиқлигини ҳисобга олади. Бу ерда 1030 нм тўлқин узунлиги учун. Протонларнинг

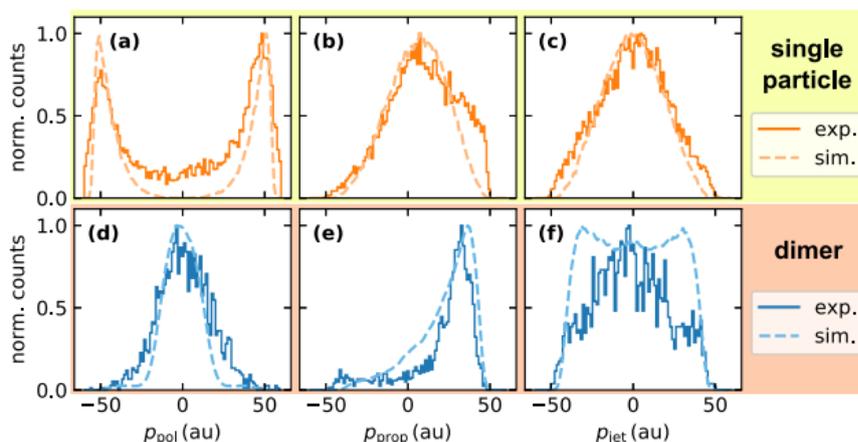
бошланғич позициялари мос келадиган эҳтимоллик тақсимотидан намуна олинади ва кейин сирт-заряд тақсимотидан олинган ижобий нукта-зарядлар намунасининг статик майдонида классик тарзда тарқалади. Нанозаррача ичидаги траекториялар эътиборга олинмайди. Якуний импульс тақсимотининг яқинлашишини таъминлаш учун намунавий зарядларнинг бир нечта тўплами симуляция қилинади. Протон ишлаб чиқариш қуввати қонунига кўра, интенсивлик протон ишлаб чиқариш учун тўйинганлик режимидан анча паст бўлади, деб тахмин қилинади, бу эса ҳар бир лазер зарбаси учун битта протон ҳосил бўлган протон тезлиги билан тажрибада таъминланади. Фокусли ҳажмни ўртача ҳисоблашнинг таъсирини эътиборсиз қолдириш мумкин, чунки тўйинмаган режимда протон ҳосилдорлиги интенсивлик билан жуда кучли ўзгаради. Димерлар учун ориентациянинг ўртача натижалари учун тахминан 600 тасодифий димер йўналишлари ишлатилган. Тезроқ яқинлашиш учун турли хил бурчак бурчаклари учун намуна олиш зичлиги  $\theta$  кутилган протон рентабеллигига мослаштирилди. Якуний протон импульси спектрлари индивидуал йўналишлар бўйича натижаларнинг вазнли йиғиндиси билан олинган.



**4-расм.** [ACS Photonics 7, 1885-1892 (2020) мақоладаги 5-расм] Нанозарралар ва димерлар учун тажриба ва симуляцияни таққослаш. (а, с) Максимал интенсивлик  $5 \times 10^{13}$  Вт см<sup>-2</sup> ва намуна концентрацияси 0,2 г/л да изоляцияланган нанозаррачалардан протонларнинг ўлчанган импульс тақсимоти. Бу эрда  $p_{prop}$  - лазернинг тарқалиш йўналиши,  $p_{pol}$  - лазернинг қутбланиш йўналиши ва  $p_{jet}$  - нанозаррачалар оқими бўйлаб импульс компоненти. (b, d) Яқка наносфералар учун мос модел симуляциялари. (e, g)  $1,85 \times 10^{13}$  Вт см<sup>-2</sup> ва 1,5 г/л намуна концентрацияси пастроқ чўккиси интенсивлигида димерлар учун экспериментал маълумотлар. (f) ва (h) димерлар наносфераси учун мос модел симуляцияларини кўрсатади.

Нанозаррачалар ва диммерлар учун эксперимент ва симуляцияларни солиштириш 4-расмда кўрсатилган. 4b-расмда кўрсатилган импульснинг 3D тақсимотининг қутбланиш-тарқалиш текислигига проекцияси экспериментал натижа билан деярли миқдорий мувофиқлигини кўрсатади (4a-расм). Қутбланишга нормал текисликка проекцияланган импульснинг экспериментал ва назарий натижалари (4c,d-расм) ҳам худди шундай даражада мос келади.

Микдор жихатдан яхшироқ намоиш қилиш учун назария ва эксперимент ўртасидаги келишув, 5а-с-расмларда барча уч ўқга импульс тақсимотининг бир ўлчовли проекцияларини кўрсатади. Кичик қийматлардаги кичик тафовутлардан ташқари  $|p_{pol}|$  (5а-расм) ва катта қийматлар  $p_{prop}$ , барча учта ўлчовли тақсимотнинг шакли модел томонидан яхши такрорланади.

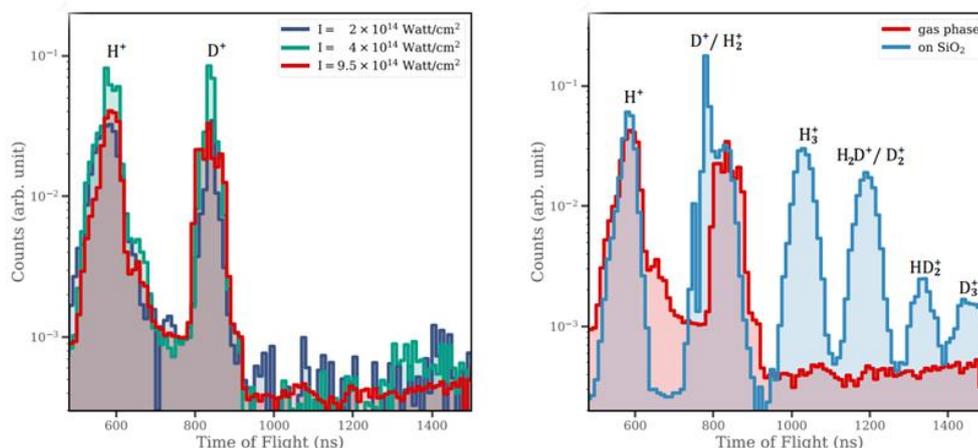


**5-расм.** [ACS Photonics 7, 1885-1892 (2020) мақоладаги 6-расм] Якка нанозарралар ва димерлар учун башорат қилинган протон импульси бўйича тақсимоти. Башорат қилинган тақсимотлар 4-расмдаги маълумотлардан олинган. Якка зарралар учун натижалар биринчи қаторда (a) - (c) кўрсатилган. Димерлар учун натижалар иккинчи қаторда (d) - (f) расмларда тасвирланган. Биринчи устун (a), (d) лазер поляризацияси бўйлаб импульс компонентини кўрсатади  $p_{pol}$ , иккинчи устун (b), (e) лазернинг тарқалиш ўқи бўйлаб импульс компоненти  $p_{prop}$  ва учинчи устун (c), (f) нанозаррачалар оқими бўйлаб компонентини кўрсатади

[Nat Commun 12, 3839 (2021)] илмий асарда  $\text{SiO}_2$  нанозаррачалари юзаларида сув/оғир сув молекулаларининг адсорбцияланиши натижасида  $\text{H}_3^+/\text{D}_3^+$  ионларининг ҳосил бўлиши каби мураккаб ва ноёб молекуляр динамикани очувчи натижалар тақдим этилган. Протон/дейтрон миграциясини, шунингдек, боғларнинг парчаланиши ва боғланиш ҳосил бўлишини ўз ичига олган ушбу бимолекуляр фотохимёвий реакция иккита сув/оғир сув молекулаларидан  $\text{H}_3^+/\text{D}_3^+$  ионларининг ҳосил бўлишига олиб келиши кўрсатилган. Натижалар интенсив фемтосекундли лазер майдонларида экзотик кимёвий реакциялар учун катализатор сифатида нанозарраларнинг яна бир хусусиятини аниқ намоиш этади. [ACS Photonics 7, 1885-1892 (2020)] илмий асарда ҳам худди бу каби экспериментал схема қўлланилган. Кремний диоксиди нанозаррачалари юзасида адсорбцияланган сув/оғир сув молекулаларидан  $\text{H}_3^+/\text{D}_3^+$  ионларининг ҳосил бўлишини ўрганиш учун  $\text{SiO}_2$  нанозаррачалар (диаметрлари 300 ва 100 нм) устида бир қатор тажрибалар ўтказилди, улар вакуум камерасига киритишдан олдин деионизацияланган  $\text{H}_2\text{O}$  ва  $\text{D}_2\text{O}$  ларда суспензияланган. Кремний нанозарралари лазер интенсивлигига дучор бўлган, улар металллашув содир бўлиши кутилаётган интенсивликдан анча паст бўлган ва шунинг учун плазмон қўзғалишларининг таъсирини эътиборсиз қолдириш мумкин. Экспириментал

натижаларнинг аниқлигини таъминлаш учун Фурье-алмаштиришли инфрақизил спектроскопияси (FTIR) ёрдамида нанозаррачалар углеводородлардан ҳоли тоза сиртга эга эканлиги тасдиқланди; юзаси фақат силаноллардан иборат. Нанозаррачалар юзаларида углеводородларнинг йўқлиги тажрибаларимиз учун жуда муҳим, чунки у чиқарилган тригидроген ва тридейтерий ионларининг манбасини аниқ ва бир маънода аниқлаш имконини беради. 6-расмда  $D_2O$  ва  $H_2O$  да суспензияланган 100 нм ўлчамли кремний диоксиди нанозарраларининг ПВ спектрлари ўртасидаги таққослаш кўрсатилган.  $D_2O$  суспензия эритмаси сифатида фойдаланилганда  $D_3^+$  нинг кузатилиши нанозаррачалар юзасида адсорбцияланган сувдан ҳосил бўлишини тасдиқловчи аниқ далилдир. Бундан ташқари,  $HD_2^+$  нинг ПВ спектрида мавжудлиги қўшимча тасдиқни беради, чунки у  $D_2$  қисми ягона  $D_2O$  молекуласида миграция механизми орқали ҳосил болганда ва қўшни силанол иони молекуласидан протон ажралиши билан ҳосил бўлиши мумкин. 6-расмдаги ПВ спектрлари мос равишда  $H_2O$  ва  $D_2O$  таркибидаги наносфералар юзаларидан чиқариладиган  $H_3^+$  ва  $D_3^+$  ўртасидаги чиқиши орасидаги сезиларли фарқни кўрсатади.  $H_3^+$  чўққиси остидаги майдоннинг  $H^+$ ,  $H_2^+$  ва  $H_3^+$  чўққилари остидаги майдонлар йиғиндисига нисбати сифатида ҳисобланган  $H_2O$  таркибида мавжуд бўлган нанозаррача юзаларидан ишлаб чиқарилганда тригидроген ионининг нисбий рентабеллиги 5,4% ни ташкил этди.  $D_2O$  ҳолатида биз кремний нанозаррачалари юзасида  $D_2O$  молекулаларидан чиқарилган  $D_3^+$  нинг нисбий рентабеллигини топдик  $\sim 0,38\%$ . Шунингдек, биз  $HD_2^+$  нинг нисбий рентабеллигини  $\sim 0,54\%$  деб ўлчадик. Шундай қилиб,  $D_3^+$  ва  $HD_2^+$  рентабеллигининг йиғиндиси  $H_2O$  даги кремний наносфералар юзасидан чиқарилган  $H_3^+$  дан камроқ бўлиб қолади. Изотополоғлар сифатида  $H_2O$  ва  $D_2O$  ионланиш энергияси ва водород миграция жараёнини бошлаш учун жуда ўхшаш интенсивлик талаби деярли бир хил қийматларга эга. Шунинг учун  $H_3^+$  ва  $D_3^+$  нинг нисбий рентабеллиги ўхшаш бўлиши кутилмоқда. Бироқ,  $H_3^+$  ва  $D_3^+$  ўртасида чиқишдаги фарқ тригидрокатсион ҳосил бўлишида бир нечта янги йўллар мавжудлигининг ажойиб имкониятларини кўрсатади, масалан (i)  $H_3^+$  ни фақат сиртда адсорбцияланган сувдан ишлаб чиқариш (ii) ёки фақат силанолдан, (iii) силанол ва сув иштирок этадиган гибрид жараён, бунда  $H_2$  силанолдан ҳосил бўлади, сўнгра сувдан протон олинади ва (iv) сувдан  $H_2$  ҳосил бўладиган гибрид жараён, кейин силанолдан протонни ажратиб олади. Агарда дейтерилланган силаноллар ҳосил бўлишида  $D_2O$  ва  $SiOH$  ўртасида сезиларли алмашинув мавжуд бўлса,  $D_3^+$  тўрт хил йўл орқали ҳосил бўлар эди ( юқорида тасвирланган  $H_2O$  ҳолатида  $H_3^+$  га ўхшаш) ва шунинг учун 6-расмдаги ПВ спектрлари  $D_3^+$  нинг юқори рентабеллигини кўрсатган бўлар эди. " $SiO_2$  да  $D_2O$ " тажрибаларида  $H_3^+$  билан солиштирганда, чунки бу ҳолда  $D_3^+$  ҳосил бўлиши дейтерациядан силанол иккита гибрид йўлга қўшимча равишда ва фақат битта  $D_2O$  дан ўтиш йўлига эга

бўлади. Бироқ,  $D_2O$  эритмасидаги заррачаларнинг турли вақт оралиғида олинган экспериментал шароитимизда силанолларнинг FTIR спектрларимиз ва кузатилган ПВ спектрлари асосида биз муҳим дейтерацияни кўрсатадиган ҳеч қандай далил топа олмадик.



**6-расм.** [Nat Commun 12, 3839 (2021) илмий асарда 2-расм]  $D_2O$  дан газ фазасида ва нанозаррачаларда ион эмиссияси. (Чап панел) Корсатилгандек турли лазер интенсивлиги учун газ фазасидаги  $D_2O$  учун парвоз вақти спектрлари ўртасидаги таққослаш. Кузатилган  $H^+$  ионлари фон газидан келиб чиқади. (Ўнг панел)  $9,5 \times 10^{14} \text{ Вт см}^{-2}$  лазер интенсивлигида газ фазасида  $D_2O$  учун олинган ПВ спектрлари ва  $1 \times 10^{14} \text{ В см}^{-2}$  лазер интенсивлигида  $D_2O$  молекулалари таркибидаги 100 нм ўлчамли нанозаррачалар юзасидан чиқарилган ионлар ўртасидаги таққослаш. Фақат нанозаррачалар билан боғланган спектр  $D_2^+$ ,  $HD_2^+$  ва  $D_3^+$  ионларининг ҳосил бўлишини кўрсатади.

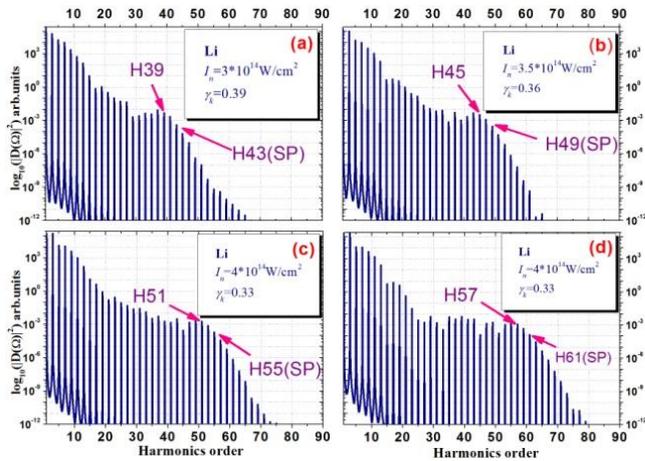
Тақдим этилган тажрибаларда кузатилган юқори энергияли  $H_3^+$  ва  $D_3^+$  ионларининг ҳосил бўлиши билан боғлиқ жараёнларнинг миқдорий изоҳи мавжуд назарий моделларга зиддир. Ишлаб чиқилиши керак бўлган ҳар қандай назарий модел нанозаррачалар юзасида сув молекулаларининг лазер майдонидан келиб чиққан ионлашуви ва парчаланиш динамикасини тўғри ҳисобга олиши керак.

**2-боб. Юқори тартибли гармоникаларни ҳосил қилиш: Оддий системалар.** Ушбу бобда "Оддий" системаларда юқори тартибли гармоникларни ҳосил қилиш жараёнларининг ҳам назарий, ҳам экспериментал тадқиқотлар натижалари келтирилган. "Оддийлик" атом тизимларининг нисбатан кичик электрон конфигурациясини ҳисобга олган ҳолда аниқланади - литий (Li) ЛХҚПда ЮГГ [Opt. Lett. 44, 3693-3696 (2019)] ва алюминий (Al)да ЛХҚП ЮГГ [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 245601 (2019)]; ва энг оддий водород молекуласи ва иони -  $H_2$  ва  $H_2^+$  дан ЮГГ спектрларини симуляция қилиш [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 155405 (2020)].

Левенштейн ЮГГ модели деб аталадиган кучли майдон яқинлашуви (КМЯ) ёндашуви доирасидаги рақамли ҳисоблар турли хил қўшимча шартлар ёки яхшиланишлар билан ишлатилган. Левенштейн ЮГГ модели учта босқични ўз ичига олади: энг юқори ишғол қилинган чегараланган ҳолатдан туннел ионланиши, лазер майдонидаги эркин электроннинг тезлашиши ва электроннинг келиб чиққан ҳолатига рекомбинацияси. Охирги босқич фотон эмиссиясига олиб келади. Оралиқ резонансларнинг ҳиссаси ҳисобга олинмайди, ядро динамикасини эътиборсиз қолдириб, молекуляр тизимнинг фақат энг юқори эгалланган атом (АО) ёки молекуляр (НОМО) орбиталдан эволюциясини ҳисобга олади.

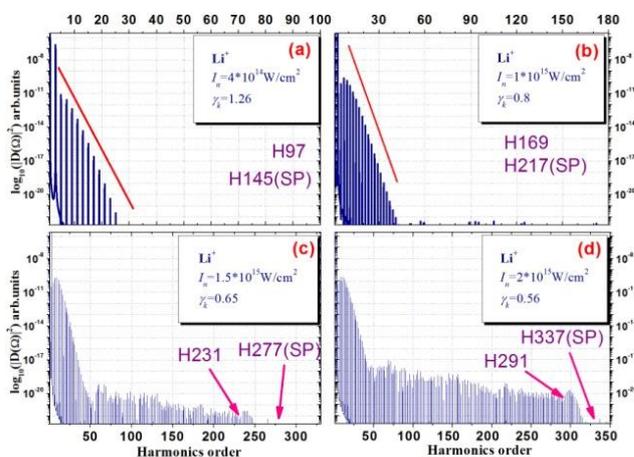
Ушбу бўлимдаги биринчи иш [Опт. Летт. 44, 3693-3696 (2019)] Li ЛХҚПлар учун ЮГГ спектрларини назарий тушунтиришга бағишланган. Юқори ионланиш потенциалнинг мақсадлари қисқа тўлқинли ЮГГ нинг истиқболли манбалари ҳисобланади. Бу ЮГГ нинг уч босқичли моделига тааллуқлидир, бу ерда кесиш энергияси  $E_{\text{cutoff}} = I_p + 3.17U_p$  билан берилади. Бу ерда  $I_p$  - атомнинг ионланиш потенциалли,  $U_p$  - лазер майдонидаги электроннинг пондеромотив энергияси. Кесиш энергиясини кенгайтириш усулларида бири ионланиш таъсирини камайтириш учун юқори ионланиш потенциалига эга (гелий ёки неон каби) мақсадли материаллардан фойдаланишдир. ЮГГ чегарасини кенгайтиришнинг муқобил усули нозикли муҳит сифатида лазер плазмаси манбасидан ишқорий ионлардан фойдаланиш орқали кўрсатилди. Уларнинг юқори ионланиш потенциалли  $I_p$  нинг ошишига имкон беради, бу ҳам кесиш энергиясини оширишга ёрдам бериши керак. Таҳлил қилинган экспериментал ЮГГ спектрлари ва кесиш позицияси 75,6 эВ юқори иккинчи ионланиш потенциалига эга бўлган Li ионларининг кутилаётган ҳиссаси билан кучли мос келмаслигини кўрсатди, бу Li ни ультрақисқа тўлқин узунликдаги когерент нурланишнинг энг истиқболли манбаига айлантиради, бу эса кузатилган кенгайтирилган кесиш позициясини тўғри талқин қилинишига халақит беради. Бундан ташқари, Li нормал шароитда қаттиқ жисмлар орасида энг оддий электрон конфигурацияга эга, бу уни симуляция қилиш ва мавжуд экспериментал маълумотлар билан таққослаш учун жозибадор қилади. Бундан ташқари, Li ион ва He атомлари учун ЮГГ спектрлари солиштирилди, чунки уларнинг иккаласи ҳам 1s ёпиқ атом орбиталига эга. Ионланиш энергияси 5,39 эВ бўлган Li атомининг 2s атом орбитали учун биз 8 та STO (Слейтер типидagi атом орбитали) асосий функциялари тўпламида кенгайтиришдан фойдаландик. ЮГГ спектрлари тўлқин узунлиги  $\lambda = 795$  нм ва импульс давомийлиги  $T_p = 150$  фс га тенг бўлган тажрибада ишлатиладиганларга яқин лазер майдонининг параметрлари учун ҳисоблаб чиқилган. Li атомининг 2s атом орбиталининг  $P_i(\Omega)$  натижалари 7-расмда, турли интенсивлик ва мос Келдиш параметри  $\gamma_k$  учун берилган.

Амалдаги лазер интенсивлиги диапазони учун  $\gamma_k$  1 дан кичик бўлиб, аниқ белгиланган плато худудига олиб келадиган туннел моделининг ҳақиқийлигини таъминлайди.



**7-расм.** [Opt. Lett. 44, 3693-3696 (2019) асарда 1-расм] Ҳар хил лазер интенсивлиги учун Li атомининг 2s атом орбиталининг  $P_i(\Omega)$  ЮГГ спектрлари,  $I_n$  ва  $\gamma_k$ . Оддий одам модели ва квант орбитал (КО) назариясига кўра, ҳар бир расмда  $H[N]$  ва  $H[N](SP)$  белгилари билан кўрсатилган, бу ерда  $H$  гармоник сондир. (a)  $I_n = 3 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup> ва  $\gamma_k = 0.39$  (b)  $I_n = 3.5 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup> ва  $\gamma_k = 0.36$ ; (c)  $I_n = 4 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup>,  $\gamma_k = 0.33$ ; (d)  $I_n = 4.5 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup> ва  $\gamma_k = 0.31$ .

Тажрибада кесишиш позициясининг юқори даражаларга ўтиши юқори иккинчи ионланиш потенциалига (75,64 эВ) эга бўлган бир зарядланган Li ионларининг ҳиссаси билан боғлиқ эди. Битта зарядланган литий иони учун тўсиқни бостириш интенсивлиги  $3,2 \times 10^{16}$  Вт см<sup>-2</sup>, нейтрал Li атоми учун эса  $I_{BSI} < 10^{12}$  Вт см<sup>-2</sup> деб баҳоланади. Шунинг учун нейтрал Li учун бундай кичик  $I_{BSI}$  билан атомларнинг кўпчилиги 150 фс лазер зарбасининг дастлабки қисмида аллақачон ионлаштирилган бўлиши кутилмоқда. Li учун лазер интенсивлиги  $I_n = 4 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup> учун 97-чи тартиб атрофида бўлади. Бироқ, тажриба бир зарядланган ионлардан ЮГГ кесиш ҳолатига ҳеч қандай таъсир кўрсатмади. Ягона зарядланган ионлар ЮГГ кесилишига ҳисса қўшмайди деган хулосани қўшимча равишда қўллаб-қувватлаш учун биз  $I_p = 75.64$  eV and  $I_n = 4 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup> учун Келдиш параметри ёрдамида ўзаро таъсирларни таҳлил қилдик. Бу қийматларда  $\gamma_k$  1,26 га тенг экан. Бу жараён мультифотон хусусиятга эга эканлигини англатади.



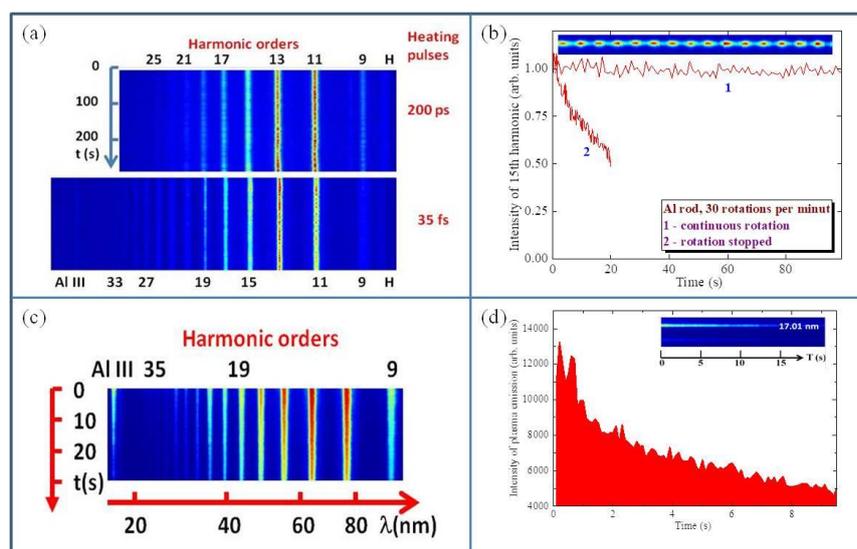
**8-расм.** [Opt. Lett. 44, 3693-3696 (2019) мақолада 2-расм] Лазер майдонининг турли интенсивлиги учун Li<sup>+</sup> ионининг 1s атом орбиталининг ЮГГ спектрлари  $P_i(\Omega)$ ,  $I_n$  ва  $\gamma_k$ . Оддий одам модели ва КО назариясига кўра, ҳар бир расмда  $H[N]$  ва  $H[N](SP)$  белгилари билан кўрсатилган, бу ерда  $H$  гармоник сондир. (a)  $I_n = 4 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup> ва  $\gamma_k = 1.26$ ; (b)  $I_n = 1 \times 10^{15}$  Вт см<sup>-2</sup> ва  $\gamma_k = 0.8$ ; (c)  $I_n = 1.5 \times 10^{15}$  Вт см<sup>-2</sup> ва  $\gamma_k = 0.65$ ; (d)  $I_n = 2 \times 10^{15}$  Вт см<sup>-2</sup> ва  $\gamma_k = 0.56$ .

Бундан ташқари, ушбу параметрлар билан Левенштейн модели ва эгар нуқтаси (SP) яқинлашувининг қўлланилиши шубҳали бўлади. Шунга қарамай, биз  $Li^+ 1s$  атом орбитали учун ҳисоб-китобларни амалга оширдик ва натижалар 8-расмда келтирилган. Шунингдек, биз ушбу шартларда кесиш ҳолатини КО баҳолашни амалга оширдик. 8(a) ва 8(b) расмлар мисолида, ЮГГ спектрлари мультифотон табиатга эга. Эгрилик функцияси (қизил чизиқ), қуйидаги  $\sim C_0(C_1 \times I_n)^k$  шаклдаги боғлиқликка мос келади, бу ерда  $k$  - гармоникалар тартиби. Плато гармоникалари фақат жуда юқори уйғотувчи импульслар интенсивлигида пайдо бўла бошлайди, буни 8(c) ва 8(d) расмларда кўриш мумкин. Кўриниб турибдики,  $\gamma_k > 1$  ва  $\gamma_k \approx 1$  учун  $Li$  ионлари ҳолатида КО ёндашуви кесиш жойни тасвирлай олмайди. Биз буни 8(b)-расмда  $\gamma_k = 0.8$  учун кўрамыз, бунда яна плато соҳаси ва 169 - тартибда гармоникалар йўқ ва шунинг учун ЮГГ спектрларида 217-тартибдаги гармоникалар пайдо бўлмайди. Бизнинг ҳисоб-китобларимиз шуни кўрсатдики, экспериментда ишлатиладиган параметрларга яқин бўлган ҳолда, кесиш қисмининг кенгайиши йўқ.

[J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 245601 (2019)] асарда ушбу манбадан олинган барқарор алюминий ЛХҚП ва ЮГГ ҳосил бўлишининг ўхшаш муаммолари ҳам назарий, ҳам экспериментал равишда ўрганилган. Экспириментал нуқтаи назардан, айланувчи Al стержен нишонидан барқарор ЮГГ концепцияси амалга оширилган. Қиздирувчи нурланиши сифатида 35 фс импульсларни қўллаш гармоник узилишни 35-гармоникагача кенгайтириш имконини берди (54,2 эВ, 9a-расм). Ушбу расмда айланувчи Al стерженини абляция қилиш пайтида барқарор гармоника ҳосил бўлиш тасвирлари кўрсатилган. Тадқиқотларимиз шуни кўрсатдики, айланувчи нишон ҳолатида барқарор гармоника эмиссия (9b-расм, 1 эгри чизиқ) айланиш тўхтатилгандан сўнг сезиларли даражада ёмонлашган (9b-расмнинг 2-эгри чизиғига қаранг). Қисқа тўлқин узунликлари оралиғда Al нинг эмиссия чизиқлари ҳақида ҳам шундай дейиш мумкин. 9c ва 9d расмларда фемтосекунд импульслари билан қўзғатилган Al III ўтиш тўлқин узунлигида плазма эмиссиясининг сўнишини кўрсатади. Al стерженнинг айланишини тўхтатгандан ўн сония ўтгач, 17,01 нм чизиқнинг интенсивлиги деярли уч баравар камайди (9c-расм). Худди шу ҳолат пикосекундли импульслар билан абляция қилинганда ҳам кузатилди. 9d-расмдаги қўшимчада 200 пс, 800 нм қиздириш импульслари ёрдамида уйғонган 17,01 нм тўлқин узунлигида Al III плазма чизиғининг ишлов берилмаган тасвирини кўрсатади.

Алюминий плазмасида кузатилган гармоник кесишни бартараф этиш учун биз ЮГГ нинг Левенштейн моделидан фойдаландик. Al ва  $Al^+$  оддий водородга ўхшаш атом орбиталлари ёрдамида моделлаштирилган. Биринчи ва иккинчи ионланиш потенциаллари 5,98 эВ ва 18,83 эВ га тенг қабул қилинди. Бизнинг ҳисоб-китобларимиз натижалари 10-расмда келтирилган. Ҳар бир спектр учун

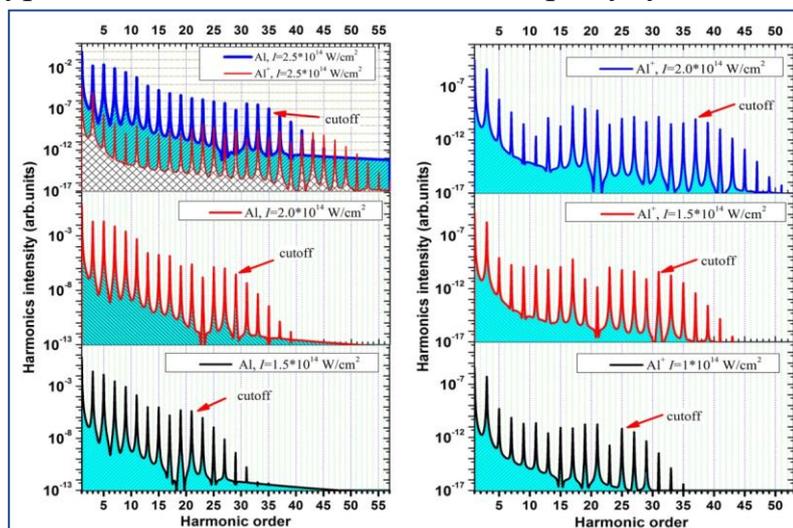
кесиш позициялари  $(I_p + 3.2U_p)/\omega$  ( $I_p$  - бу ионланиш потенциаллари,  $U_p$  - электроннинг пондермотив энергияси ва  $\omega$  - лазер частотаси) ифода ёрдамида баҳоланди, бунда кесишманинг бутун қисмига тенг эди. Тўсиқни бостириш интенсивлигини баҳоланда бизга биринчи ионланиш потенциаллари учун  $I_{BSI} = 2.6 \times 10^{13}$  Вт см<sup>-2</sup> ва иккинчи ионланиш потенциаллари учун  $I_{BSI} = 2.7 \times 10^{15}$  Вт см<sup>-2</sup> ни беради. Бизнинг соддалаштирилган моделimiz фокус нуқтада лазер майдонининг интенсивлиги қийматида баъзи номувофиқликларни юзага келтиради.



**9-расм.** [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 245601 (2019) мақолада 4-расм] Айланадиган алюминий стерженда ҳосил қилинган плазмадан плазма ва гармоник спектрларнинг барқарорлик ўлчовлари. (a) 5 дақиқа давомида йиғилган ЮГГ спектрларининг бирлаштирилган тасвирлари. Спектрларнинг юқори ва пастки панеллари Al стерженнинг мос равишда 200 пс ва 35 фс импульслар билан қиздирилишига мос келади. (b) пикосекундли импульслар натижасида ҳосил бўлган алюминий плазмасидан ҳосил бўлган 15-гармониканинг интенсивлигининг вақтга боғлиқ ўзгариши. 1 эгри чизик Al стерженнинг доимий айланишига мос келади ва 2 эгри чизик айланишнинг кескин тугашига тўғри келади. Киритилган: айланувчи алюминий стерженнинг 1,5 сония абляция қилиш давомида йиғилган H15 нинг 15 та импульсларининг суратлари. (c) 0 с га тўғри келадиган моментда айланиш стержени кескин тўхтатгандан сўнг плазма эмиссияси (17,01 нм, Al III) ва гармоникларнинг сусайиши. (d) тўхтатилган Al нишонининг абляцияси пайтида 35 фс импульслар билан қўзғатилган 17,01 нм эмиссиянинг пасайиши. Киритилган: 200 пс импульслар билан қўзғатилган абляция стержен айланиши тўхтагандан кейин Al III нинг 17,01 нм эмиссия чизигининг сусайишини кўрсатадиган ЭУБ спектрининг қисмининг тасвири.

Ҳисоб-китобларга кўра, ЮГГ спектрлари нейтрал Al атомлари учун  $I \approx 2.5 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup> ва Al<sup>+</sup> учун  $I \approx 2 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup> да H35 кесиш чегарасига эришади. Тажриба ( $I \approx 3.5 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup>) ва назария ўртасидаги фарқни қисман лазер интенсивлигининг экспериментал ўлчовларининг ноаниқлиги билан изохлаш мумкин. Мусбат зарядланган ионларнинг мавжудлиги плазма эмиссиясини кузатиш билан тасдиқланган бўлса-да, Левенштейн

моделли  $Al^+$  ионлари учун алмаштириш самарадорлигини анча паст деб тахмин қилади. 10-расмнинг юқори чап панелида биз  $Al$  ва  $Al^+$  дан иккита ЮГГ спектрини кўрсатамиз лазер интенсивлиги  $I \approx 2.5 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup>, плазманинг иккита компонентида алмаштириш самарадорлигини солиштириш мумкин, бу эса плазмада етарлича паст бўлади. ЮГГ платосининг ўртасида  $Al^+$  ҳолати ва кесиш чегара ҳудудида 2 даража камроқ.

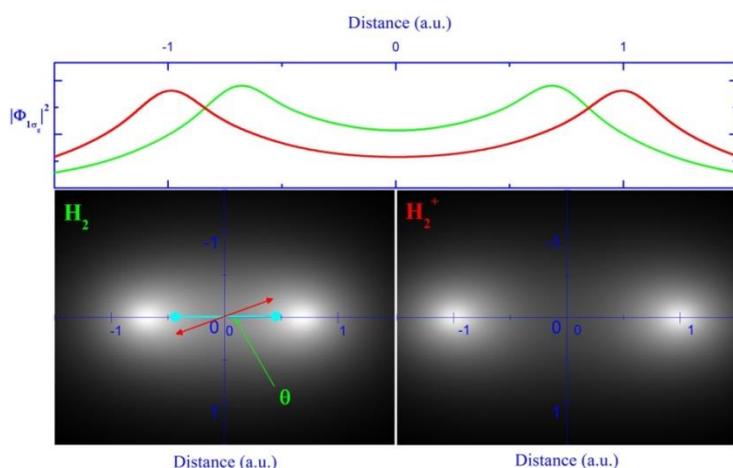


**10-расм.** [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 52, 245601 (2019) мақолада 3-расм]  $Al$  (чап панел) ва  $Al^+$  иони (ўнг панел) учун ҳисобланган гармоника спектрлари.

[J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 155405 (2020)] мақолада биз  $H_2$  ва  $H_2^+$  молекулаларидан ЮГГ масаласини ҳал қиламиз, улар ҳар қандай назарияни синаб кўриш учун энг оддий молекуляр системалар бўлиш учун жуда жозибали. Бундан ташқари, ушбу системалардан ЮГГ бўйича олдинги башоратлар экспериментал ўлчашлар билан тасдиқланмаган. Биз бошланғич майдонсиз фаол энг юқори эгалланган молекуляр орбитални (НОМО) атом орбиталларининг чизиқли комбинацияси (АОЧК) сифатида кўрсатишга асосланган ГАМ (Гаусс аниқ модели) сифатида белгиланган умумлаштирилган ёндашувни тақдим этамиз ва уни  $H_2$  ва  $H_2^+$  молекулаларида ЮГГ масаласига қўллаймиз. КМЯнинг ўзига хос ғоясига кўра, фазовий (шу жумладан барча симметриялар) ва импульс электрон тақсимоти ҳақидаги барча маълумотлар дастлабки тўлқин функциясида мавжуд бўлганлиги сабабли, уни тўғри тарзда қуриш жуда муҳимдир. Умумий усуллар Ҳартри-Фок -Рутан ечимларининг жадвал маълумотларини қўллаш ёки GAUSSIAN ёки GAMESS каби ҳисоблаш кимё кодлари ёрдамида коэффициентларни аниқлашдир. Бундан ташқари, танловга қараб, НОМО, Слатер типигаги орбиталларни (STO) ва Гаусс типигаги орбиталларни (GTO) тахминий кўрсатиш учун иккита турдаги базавий тўпламлар пайдо бўлади. Биз GTO асосини танладик, чунки у индукцияланган молекуляр дипол моменти учун ёпиқ аналитик ифодани олиш имконини беради. Олинган ифодадан фойдаланиб,

биз турли лазер параметрлари билан  $\text{H}_2^+$  ва  $\text{H}_2$  оддий диатомик молекулалар учун ЮГГ спектрларини таҳлил қиламиз.

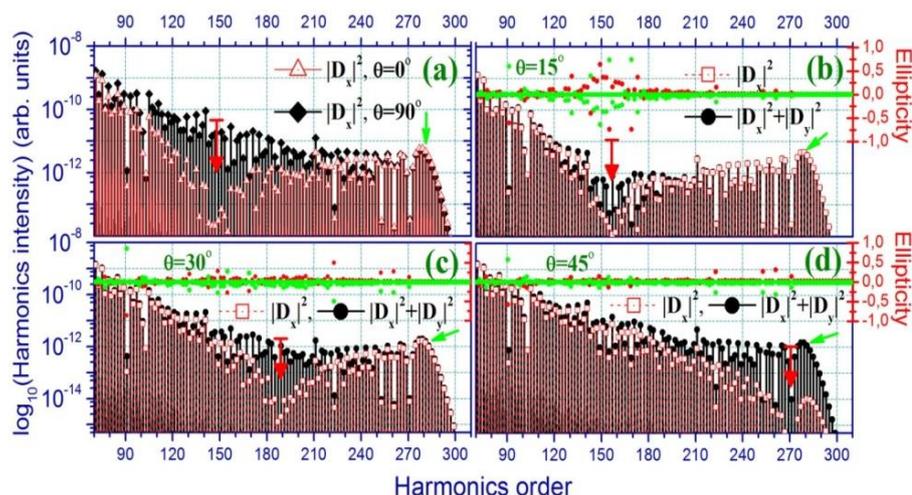
Аввало, лазер майдони бўлмаганда бошланғич моментда фаол электроннинг бошланғич тўлқин функциясини аниқладик. 11-расмда  $\text{H}_2$  (чап пастки панел) ва  $\text{H}_2^+$  (ўнг пастки панел) молекулалари учун  $(x, y)$  текислигида  $|\Phi|^2$  эҳтимоллик тасвирлари кўрсатилган. Бу тўлқин функциялари мос равишда  $\text{H}_2$  ва  $\text{H}_2^+$  молекулалари ҳолатида танланган STO-6G асосида Gaussian 03 коди, чекланган Ҳартрее-Фок (RHF) ва чекланмаган Ҳартрее-Фок (UHF) моделлари ҳисоб-китоблари ёрдамида олинган. Ядролараро масофа  $\text{H}_2$  учун  $2 \times r_0 = 1,4$  а.е. ва  $\text{H}_2^+$  учун  $2 \times r_0 = 2$  а.е. даражада белгиланган (11-расм, юқори панел).  $\text{H}_2$  учун қайта тикланган "вертикал" ионланиш энергияси ва  $\text{H}_2^+$  учун ионланиш потенциали экспериментал қийматларга яқин.



**11-расм.** [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 155405 (2020) мақолада 1-расм] Лазер поляризацияси ўқи (қизил стрелка) ва молекула ўқи(учларида 2 доира бўлган кўк чизик)нинг схематик ориентацияси (чап пастки панел) билан Gaussian 03 кодини  $\text{H}_2$  (пастки чап панел) ва  $\text{H}_2^+$  (пастки ўнг панел) молекулалари учун ҳисоблаш асосида олинган эҳтимоллик тасвирлари.  $\theta$  – ушбу иккита йўналиш орасидаги бурчак. Юқори панелда  $\text{H}_2$  (яшил узлуксиз чизик) ва  $\text{H}_2^+$  (қизил узлуксиз чизик) учун молекуляр ўқи бўйлаб кесма кўриниши чизилган.

12-расмда  $\lambda = 1300$  нм ва  $I_n = 5 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup> учун натижаларни чизамиз. Лазер майдонининг ушбу параметрларида бизда  $N_{\text{cutoff}} = 281$  га тенг. 12-расмнинг (а) панелида  $\theta = 0^\circ$  (очик қизил учбурчаклар) ва  $\theta = 90^\circ$  (тўлдирилган қора ромблар) чегараланган ҳолатлар учун спектрлар кўрсатилган. Бу эрда  $\theta = 0^\circ$  да  $D_x$  учун 145-гармоника атрофида платода аниқ белгиланган минимумни кузатамиз. Минимум платонинг ичида чуқур жойлашганлиги сабабли, унинг водийси кесиш соҳасига таъсир қилмайди. Лазер майдонига параллел жойлашган  $D_x$  компоненти (очик қизил квадрат) учун  $\theta = 15^\circ, 30^\circ$  ва  $45^\circ$  ((b), (c) ва (d) панеллар) да интерференциянинг минимум силжиши, 155-, 189- ва 269-чи тартиблар минимал позицияларига мос келади. (b), (c) ва (d) панеллар учун умумий спектрал интенсивлиги  $W$  (қора тўлдирилган доиралар)  $D_y$  нинг нолга тенг бўлмаган ҳиссасини ҳисобга олган ҳолда ҳисоблаб чиқилган. Яна кўриш мумкинки,  $\theta$  ортиши билан минимумлар эффекти йўқолади. Бу хусусият (c) ва (d)

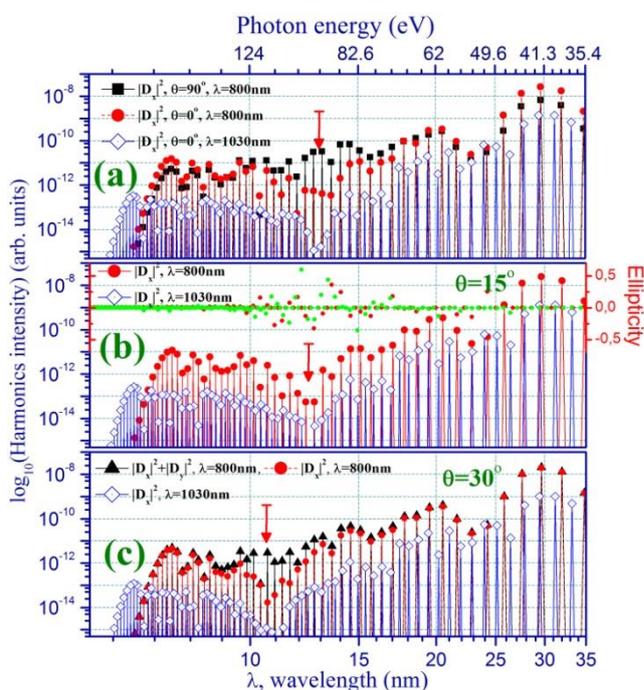
панелларида аниқ кўринади, бу ерда биз  $W$  учун текис плато ҳудудига эгамиз. Натижада, интенсивлик ёки фотонларни ҳисоблаш усуллари асосланган гармоника детекторлар билан тажрибаларда юқори  $\theta$  да минимумларнинг мавжудлигини таниб бўлмайди. Яна бир хулоса шундан иборатки, молекулаларни фазода импульсолдисига кўра жуда аниқ йўналтириш зарурати, чунки интерференция минимумлари фақат  $\theta = 0^\circ$  атрофидаги тор бурчаклар учун яхши кузатилади ва интерференция минимумлари ҳолатининг молекула бурчагига боғлиқлиги ўз ўрнини платодан ташқарига силжитиши мумкин.



**12-расм.** [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 155405 (2020) мақолада 3-расм]  $\lambda = 1300$  нм и  $I_n = 5 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup> да H<sub>2</sub> молекуласи учун ҳисобланган гармоник спектрлар. Қизил стрелкалар минимал ўринларни, яшил стрелкалар эса кесишларни кўрсатади. (а) панел  $\theta = 0^\circ$  (қизил очик учбурчаклар) ва  $\theta = 90^\circ$  (қора тўлдирилган ромб) да  $D_x$  компоненти учун ЮГГ спектрларини тақдим этади. (б) панел  $\theta = 15^\circ$  да  $D_x$  (очик қизил квадратлар) ва  $W = |D_x|^2 + |D_y|^2$  (тўлдирилган қора доиралар) компонентларининг спектрлари келтирилган; Кўшимчада  $\theta = +15^\circ$  (яхлит қизил доиралар) ва  $\theta = -15^\circ$  (яхлит яшил доиралар) учун ҳисобланган эллиптикликни кўрсатади. (с) панел  $\theta = 30^\circ$  да  $D_x$  компоненти (очик қизил квадратлар) ва  $W$  (тўлдирилган қора доиралар) учун спектрларни кўрсатади; кўшимчада  $\theta = +30^\circ$  (яхлит қизил доиралар) ва  $\theta = -30^\circ$  (яхлит яшил қаттиқ доиралар) учун эллиптикликларни тақдим этади. (д) панел  $\theta = 45^\circ$  да  $D_x$  компоненти (очик қизил квадратлар) ва  $W$  (тўлдирилган қора доиралар) учун спектрларни кўрсатади; кўшимчада  $\theta = +45^\circ$  (яхлит қизил доиралар) ва  $\theta = -45^\circ$  (яхлит яшил доиралар) учун эллиптикликларни тақдим этади.

Поларизация хусусиятларига келсак, бизнинг моделimiz  $\theta$  нинг кичик кийматларида спектрал минимумлар атрофида эллиптик поларизацияланган гармоникаларнинг мавжудлигини тахмин қилади. Бу ўзига хослик 12-расмнинг (б) панелида кўрсатилган. Гармониканинг эллиптиклиги молекуляр ўқнинг мусбат ( $\theta = +15^\circ$ ) ва манфий ( $\theta = -15^\circ$ ) йўналишлари айланишига мос келадиган яхлит қизил ва яшил доиралар билан чизилган. 12-расмдаги (с) ва (д) панеллари  $\theta$  бурчак ортиши билан эллиптиклик пасайишини кўрсатади. Бироқ,  $D_y$  минимум минтақадаги  $D_x$  камайишини компенсация қилганлиги сабабли, гармоникларнинг кутбланиш йўналиши у йўналиши бўйлаб йўналтирилган

бўлиб, чизикли кутбланган бўлиб қолади. Бу таъсир 12-расмнинг (д) панелида  $\theta = 45^\circ$  да кесиш гармониклари учун кучли ифодаланган. 13-расмда биз турли лазер параметрлари ва  $\theta$  да  $\text{H}_2^+$  ионидан ҳисобланган ЮГГ спектрларини тақдим этамиз.  $\lambda = 800$  нм да ЮГГ спектрлари  $\theta = 0^\circ$  ва  $\theta = 90^\circ$  учун бирлаштирилади, чунки аввалги ҳолатда интерференция минимуми унчалик аниқ эмас ва уни  $\theta = 90^\circ$  фон спектрига нисбатан таниб олиш осонроқ. Ушбу тўлқин узунликлари учун минимал позициялар  $\lambda_H = 13$  нм атрофида (61- ва 79-чи тартиблар). Панеллар (б) ва (с)  $\theta = 15^\circ$  ва  $30^\circ$  учун минимумларнинг позицияларини кўрсатади. Кўриниб турибдики, кичик бурчаклар учун ( $0^\circ$  ва  $15^\circ$ ) минимумларнинг позициялари деярли бир-бирига тўғри келади. Панелдаги (б) ўрнатилган  $\lambda = 800$  нм (яхлит қизил доиралар) ва  $\lambda = 1030$  нм (яхлит яшил доиралар) учун чиқарилган гармоникаларнинг кутбланиш хусусиятларини кўрсатади. Минимум атрофидаги гармониклар гуруҳи 12-расмда кўрсатилган ҳолатларга ўхшаб, эллиптик поляризацияланган. (с) панел  $\lambda = 800$  нм (қора тўлдирилган учбурчаклар) да умумий интенсивлик  $W$  ни кўрсатади, бу ерда минимум кесилганда  $D_y$  компоненти доминантга айланади.

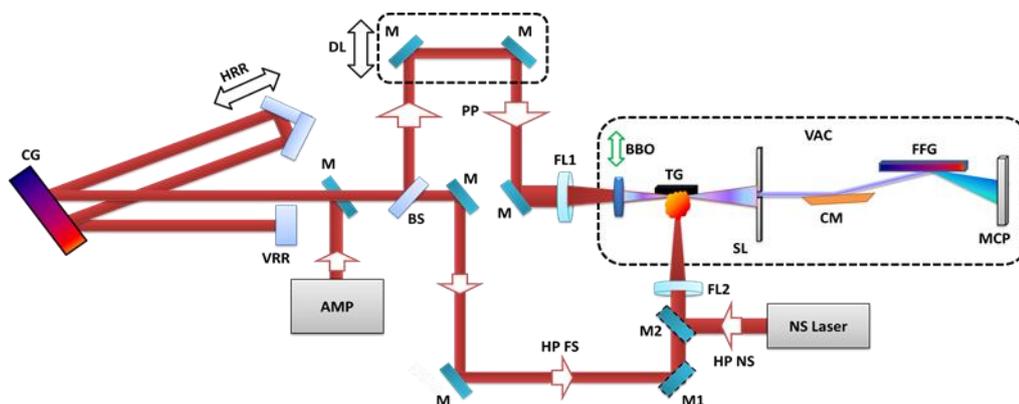


**13-расм.** [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 155405 (2020) мақолада 5-расм]  $\text{H}_2^+$  иони учун ҳисобланган гармоник спектрлар. Қизил стрелкалар интерференция минимум позицияларини кўрсатади. (а) панел  $\theta = 0^\circ$  да  $D_x$  компоненти учун ЮГГ спектрларини кўрсатади,  $\lambda = 800$  нм,  $I_n = 7 \times 10^{14}$  Вт  $\text{см}^{-2}$  (тўлдирилган қизил доиралар),  $\theta = 90^\circ$  да,  $\lambda = 800$  нм,  $I_n = 7 \times 10^{14}$  Вт  $\text{см}^{-2}$  (тўлдирилган қора квадратлар), ва  $\theta = 90^\circ$  да  $\lambda = 1030$  нм,  $I_n = 5 \times 10^{14}$  Вт  $\text{см}^{-2}$  (очик кўк ромблар). (б) панел  $\theta = 15^\circ$  да  $D_x$  компоненти учун ЮГГ спектрларини кўрсатади,  $\lambda = 800$  нм,  $I_n = 7 \times 10^{14}$  Вт  $\text{см}^{-2}$  (тўлдирилган қизил доиралар) ва  $\lambda = 1030$  нм,  $I_n = 7 \times 10^{14}$  Вт  $\text{см}^{-2}$  (очик кўк ромблар). Қўшимча расм гармоникаларнинг эллиптиклигини кўрсатади. (с) панел  $\theta = 30^\circ$  да  $D_x$  компоненти учун ЮГГ спектрларини кўрсатади,  $\lambda = 800$  нм,  $I_n = 7 \times 10^{14}$  Вт  $\text{см}^{-2}$  (тўлдирилган қизил доиралар) ва  $\lambda = 1030$  нм,  $I_n = 5 \times 10^{14}$  Вт  $\text{см}^{-2}$  (очик кўк ромблар), ва  $\theta = 30^\circ$  да умумий гармоник рентабеллик  $W$ ,  $\lambda = 800$  нм,  $I_n = 7 \times 10^{14}$  Вт  $\text{см}^{-2}$  (тўлдирилган қора учбурчаклар).

ГЕХ моделининг LCAO НОМО тасвири билан биргаликда умумлаштирилиши бизга эгар нуктаси усулидан фойдаланмасдан уч ўлчовли импульс интегралларини аналитик ҳисоблаш имконини берди. Биз НОМО симметриясининг ЮГГ спектрларининг бундай ўзига хос хусусиятига, интерференция минималларининг мавжудлигига аниқ таъсирини кўрсатдик. Биз тўғридан-тўғри TDSE тенгламаси рақамли симуляция асосида хулосаларини тасдиқладик, ЮГГ спектрларида интерференция минималларининг ҳолати лазер нурланишининг тўлқин узунлиги ва интенсивлиги каби параметрларига боғлиқ эмас. Минималларнинг жойлашуви фақат молекуляр орбитал ва чизикли поляризацияланган лазер майдонининг кутбланиш йўналиши ва молекуляр ўқи ўртасидаги  $\theta$  бурчакни боғлаш учун молекуладаги ядролараро масофага кучли боғлиқ. Минимум минтақа атрофидаги гармоникларнинг кутбланиш хоссалари  $\theta$  ўзгариши билан кучли ўзгаришини кўрсатдик.

**3-боб. Юқори тартибли гармоникаларни ҳосил қилиш: Мураккаб ҳодисалар.** Ушбу боб резонансга эга бўлган материаллар, нанозарралар ва кўп оқимли ЛХҚПларнинг ҳосил бўлиш шароитлари ва дамлаш импульсларининг хусусиятларини ўзгартириш билан бирлаштирилган газлар ва ЛХҚПларда ЮГГ жараёнида кузатиладиган мураккаб ҳодисаларга бағишланган. [New J. Phys. 22, 083031 (2020)] мақолада, дамлаш шароитларининг ўзгариши билан Ар газида Купер минимуми назоратини тизимли ўрганиш тақдим этилди. Молибден ЛХҚП дан якка, кучайтирилган резонансли гармоникаларни ҳосил қилиш TDSE ни ечиш билан ҳам назарий, ҳам экспериментал [J. Phys. B: At. Mol. Opt. fizika. 53, 195401 (2020)] мақолада келтирилган. Резонанс кучайтирилган гармоникага эга бўлган материалларга тузилган, кўп оқимли плазма шульаларини қўллашнинг биргаликдаги таъсири [Opt. Continuum 1, 1098-1116 (2022)] мақолда таҳлил қилинган. Металл ва яримўтказгич карбид материалларидан тайёрланган нанозаррачаларни ўз ичига олган ЛХҚПлардан ЮГГ билан натижалар [Nanomaterials 12, 4228. (2022)] мақолада келтирилган.

Жорий ва олдинги бобларда келтирилган ишларнинг экспериментал натижаларининг кўпчилиги бизнинг гуруҳимиз томонидан Чангчун Оптика, нозик механика ва физика институтида (CIOMP, Хитой), Шаржа Америка университетида (AUS, Бирлашган Араб Амирликлари) қурилган ЮГГ қурилмалари билан олинган. ЮГГ объектининг умумий схемаси 14-расмда тақдим этилган.

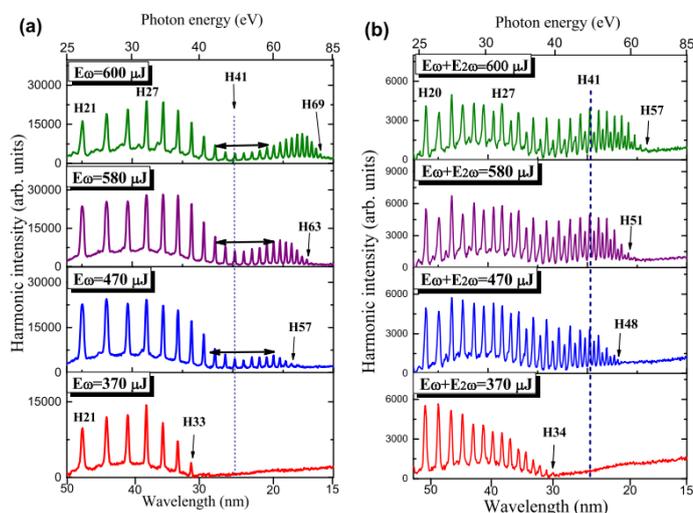


14-расм. ЮГГ нинг умумий экспериментал схемаси.

Кучайтиргичдан (AMP) кейин компрессланмаган пикосекундли лазер импульси ойна (M) орқали компрессловчи панжара (CG), вертикал ретрорефлектор (VRR) ва горизонтал ретрорефлектор (HRR) дан иборат бўлган компрессорга йўналтирилади. Компрессланган зонд импульси (PP) оптик кечикиш чизиғи (DL) орқали тарқалади ва кейин нишон камераси ва ЭУБ спектрометрини ўз ичига олган вакуум камераси (VAC) ичидаги сферик фокусловчи линза (FL1) орқали фокусланади. Фокусланган импульслар плазманинг икки рангли дамлаши учун иккинчи гармоника (SH) нурни ҳосил қилиш учун 0,2 мм қалинликдаги барий борат (BBO) кристали орқали тарқалади. Фемтосекунд/пикосекундли/наносекундли қиздириш импульслари (HP FS) лазер плазмасини ёқиш учун нишонга (TG) фокусловчи линза (FL2) томонидан қаратилган. Ихтиёрий, наносекундли қиздириш импульсларидан (HP NS) фойдаланиш мумкин. Генерацияланган гармоникалар ва асосий нурланиш тирқиш (SL) орқали тарқалади ва олтин билан қопланган цилиндрсимон ойна (CM), текис майдон панжараси (FFG) ва микроканалли пластинкани (MCP) ўз ичига олган ЭУБ спектрометрига киради. M1 ва M2 - бу фемто/пико ёки наносекундли қиздириш импульслари ўртасида танлаш учун айлантирувчи мосламалардаги ойналар.

Инерт газ нишонларидан юқори тартибли гармоника эмиссияда аниқ локал минимумнинг кузатилишини Купер минимуми (KM) деб аталадиган бармоқ изи сифатида кўриб чиқиш мумкин, бу инерт газларнинг ЭУБ фотоионланишида ҳам мавжуд. Ар нинг бир атомли ЮГГ спектридан гармоникаларнинг тақсимланишида минимумнинг пайдо бўлиши электроннинг атом ионига радиацион рекомбинацияси билан боғлиқ бўлиб, бу фотоионланишнинг тескари жараёни бўлиб, бунда кесма минимал бўлади. Бу [New J. Phys. 22, 083031 (2020)] мақолада асосий нурланишнинг иккита ортогонал-поляризацияланган майдонини ва унинг иккинчи гармоникасини қўллаш, шунингдек, тоқ ва жуфт

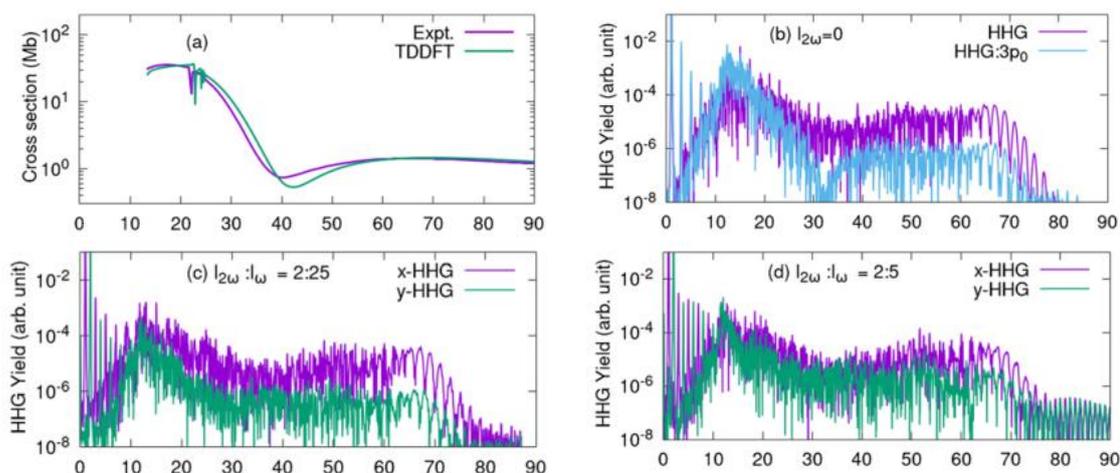
гармоникаларнинг бошқариладиган рентабеллигини яратиш учун ишлатилади, гармоника спектрларда КМнинг пасайишига олиб келди.



**15-расм.** [New J. Phys. 22, 083031 (2020) мақолада 3-расм] Ҳар хил экспериментал шароитларда Ар да ҳосил бўлган гармоникалар спектрлари. (а) Бир рангли дамлаш (1030 нм) ҳолатида фокуси сферик линзалар олдида жойлаштирилган ирис диафрагмаси диаметрини ўзгартириш орқали кесиш энергиясини ўзгартириш. Чизикли қора чизик фотон энергияси  $\sim 49$  эВ (H41) да КМ ҳолатини кўрсатади. Яхлит стрелкалар КМ кенглигини кўрсатади. (б) Худди шу боғлиқликлар аргоннинг ортогонал кутбланган икки рангли дамлаши (1030 нм + 515 нм) мисолида келтирилган, бу унда КМ йўқлигини кўрсатади. Ушбу расмдаги тўқ қора чизик битта рангли дамлаш ҳолатида КМ ҳолатини кўрсатади.

Турли хил гармоникаларнинг интенсивлиги, шунингдек, КМ нинг кенглиги ва чуқурлиги турли хил экспериментал шароитларда, хусусан, 1030 нм импульсларнинг интенсивлиги ва фазовий шароитларини ўзгартириш ва 15-расмда кўрсатилганидек, икки рангли лазер дамлаш ёрдамида таҳлил қилинди. Ушбу тажрибаларда ҳаракатлантирувчи нурларнинг ўлчамлари ўзгарувчан диаметрли ирис ёрдамида ўзгартирилди. Бундан ташқари, газ оқими фокуси линзаларнинг фокус текислигига нисбатан турли позицияларда ҳаракатлантирилди. Аг да ҳаракатлантирувчи импульсларнинг дефокуслаш ёрдамида фаза мос келмаслигига асосланган фазага мос келадиган шароитларни ўзгартириш орқали КМнинг йўқолиши 15-расмда (а) кўрсатилган [ $E_\omega = 470$  мкЖ, ирисдан кейин 12 мм нур диаметрида]. Шунингдек, биз КМ кенглигининг ҳаракатлантирувчи лазер импульсларининг энергиясига боғлиқлигини таҳлил қилдик. 15-расмдаги (а) панеллар гармоника кесиш энергиясининг ҳаракатлантирувчи фемтосекунд импульсларининг энергиясига боғлиқлигини кўрсатади. Лазер импульслари энергиясининг ошиши кесиш энергиясининг ошишига олиб келди. Бу тажрибалар давомида 69-тартибга қадар гармоникалар кузатилди [ $\lambda = 14.9$  нм, 15(а)-расмнинг юқори панели]. Икки рангли дамлаш схемасида, нур диаметрининг ўзгариши билан ҳеч қандай КМ кузатилмади [15(б)-расм.], лекин, кучли тоқ ва жуфт гармоникаларнинг ҳосил бўлиши ҳаракатлантирувчи ва SH импульсларининг умумий энергиясига ( $E_\omega + E_{2\omega}$ ) боғлиқлиги кузатилди.

Ar ЮГГ механизмларини назарий тушунтириш учун вақтга боғлиқ бўлган Шредингер тенгламаси рақамли интеграллаш амалга оширилди. Тажрибада ортогонал-поляризацияланган лазер майдонлари ишлатилганлиги сабабли, тўлиқ уч ўлчовли TDSE учун ечим тақдим этилган. Фокус ҳажми эффекти ва тарқалишда фаза мослигини ҳисобга олиш учун TDSE турли хил инфрақизил нурланиш интенсивлиги ва икки рангли лазер майдонларининг турли нисбатлари учун минг марта амалга оширилган. Фазаларни мослаштириш жараёнидан кейин КМ ювилиши мумкинлиги сабабли, атом даражасида ЮГГдаги КМ динамикасини ўрганиш учун биринчи навбатда фокус ҳажмининг ўртача ва фаза мослашувисиз атомар даражада ЮГГ тақдим этилди. Симуляциянинг яқинлашиши узунлик ва тезланиш шаклларида олинган натижаларни солиштириш орқали текширилди ва фақат тезлаштириш шаклидаги ЮГГ тақдим этилди. 16-расмда ортогонал-поляризацияланган лазер майдонларида Ar атомларининг ЮГГ кўрсатилган. Шунингдек, чизикли жавоб назариясига асосланган экспериментал якка фотоионлаш кесим юзаси ва симуляциялар тасвирланган.

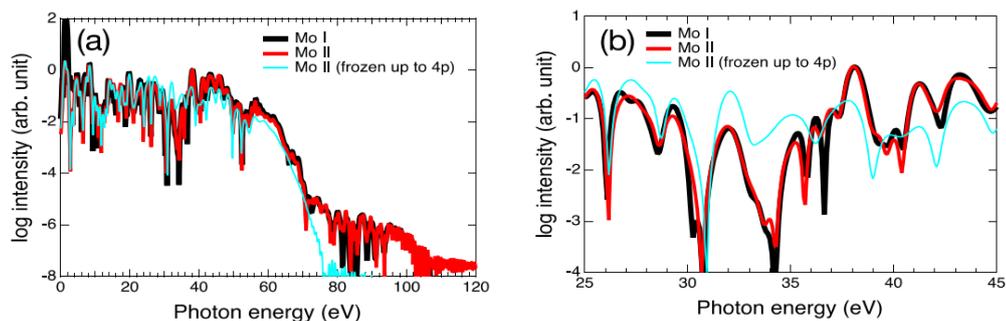


**16-расм.** [New J. Phys. 22, 083031 (2020) мақолада 5-расм] (а) Тажриба ва симуляциялардан Ar нинг якка фотоионлаш кесим юзалари. Икки рангли лазер майдонида Ar атомларидан ҳосил бўлган ЮГГ спектрларининг ўзгариши; (б)  $I_{2\omega}:I_{\omega} = 1:0$ ; (с)  $I_{2\omega}:I_{\omega} = 25:2$ ; анд (д)  $I_{2\omega}:I_{\omega} = 5:2$  ва  $I_{\omega} = 2 \times 10^{14} \text{ Wcm}^{-2}$ .

Симуляцияларда кутбланганлик тўғридан-тўғри ҳисоблаб чиқилган, унинг ҳақиқий қисми Ar газининг синдириш кўрсаткичига тегишли ва мавҳум қисми 16 (а)-расмда кўрсатилганидек, фотоабсорбсияни ифодалайди. Симуляциялар 16 (а)-расмда кўрсатилганидек, фотоионизация учун ўлчашлар билан яхши мос келади. d-парциал тўлқинга якка фотоионланиш кесим юзаси нолга интилади ёки КМ 40 эВ га етади, бу ўлчанган қийматидан паст. Ушбу энергия режимида  $3p \rightarrow s$ -парциал тўлқин учун КМ йўқ ва кесим юзаси жуда кичик. Симуляцияларда инфрақизил нурланиш импульсларининг тарқалиш йўналиши сифатида z-

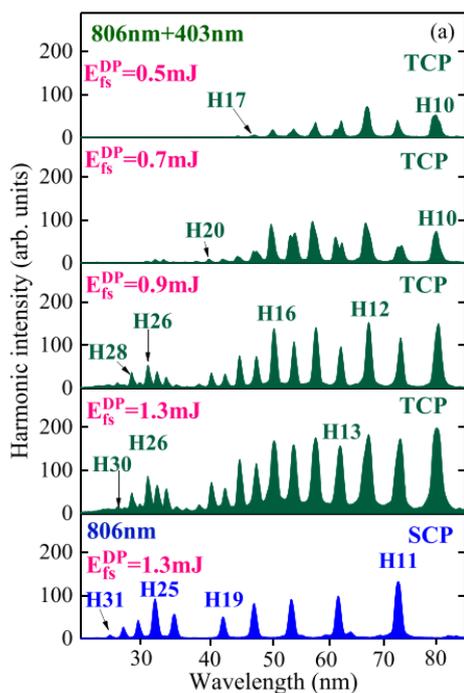
йўналиши ва қутбланиш йўналиши сифатида х-йўналиши танланган. Иккинчи гармоника лазер майдонининг поларизацияси у-йўналиши бўйлаб йўналган. КМнинг физикавий келиб чиқишини аниқ кўрсатиш учун битта рангли лазер майдонида  $Ag\ 3p_0$  дан (магнит квант сони = 0) ЮГГ ни 16-расм (б)да чизилган. Магнит квант сонининг сақланиши вақтида  $3p_0$  ҳолати фақат магнит квант сони  $m = \pm 1$  бўлган ҳолатда эриша олади, х-йўналишида қутбланган фотоннинг s-ҳолатида эмас, шунинг учун s-парциал тўлқин ЮГГ га ҳисса қўшмайди ва 30-гармоника тартиби атрофида жуда чуқур минимум мавжуд бўлади. Бу мазкур модел потенциалидан КМни сифат жиҳатидан текшириш учун фойдаланиш мумкинлигини кўрсатади, гарчи у ўлчанган қийматидан фарқ қилса ҳам. Иккинчи гармоника лазерсиз, ЮГГ 16(б)-расмда кўрсатилганидек,  $3p_{\pm 1}$ ,  $3p_0$  ҳолатларидаги барча ҳиссаларни изчил йиғганимиздан кейин ҳам аниқ КМни кўрсатади (пастки белгилар магнит квант рақамларини англатади). Жой ўзгаради ва кенглик ўзгарувчан ток силжиши туфайли инфрақизил лазер майдони томонидан кенгайтирилади. КМ ҳатто жуда кучли лазер майдонида ҳам мавжуд. Асосийга ортогонал (х йўналиши бўйича қутбланган) иккинчи гармоника лазер майдони қўшилса, жуфт ва тоқ гармоникалар й йўналиши бўйлаб қутбланувчи жуфт гармоникалар ва бўйлаб қутбланувчи тоқ гармоникалар пайдо бўлади. 16(с)-расмда кўрсатилгандек х-йўналиши. Иккинчи гармониканинг интенсивлиги 16 (d)-расмда кўрсатилганидек, янада ортиб борар экан, КМ деярли йўқолади.

Лазер ёрдамида ҳосил қилинган  $Mo$  плазмасида гармониканинг 32 нм яқинида кучайиши [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 195401 (2020)] мақолада келтирилган. Резонансли гармоника кучайтириш жараёнини оптималлаштириш учун турли усуллар ёрдамида таҳлил қилинган. Ночизикли оптик жавобнинг ошишига олиб келадиган катта осцилятор кучига эга кучли ион ўтишининг роли муҳокама қилинган. Экспериментал натижалар вақтга боғлиқ бўлган тўлиқ фаол макон ўз-ўзидан изчил майдон усули (TD-CASSCF) деб аталадиган реал вақтда тўлиқ электрон уч ўлчовли аб-инитио усулининг замонавий татбиқ этилишидан фойдаланган ҳолда  $Mo$  ЮГГ нинг рақамли симуляциялари билан таққосланди. Бу усулда бутун электронли умумий тўлқин функцияси вақтга боғлиқ бўлган спин-орбитал функциялардан ташкил топган Слейтер детерминантларининг қуйидаги суперпозицияси билан ифодаланади. 806 нм марказий тўлқин узунлиги,  $2 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup> максимал интенсивлиги ва оёқдан оёққа тўрт даврли  $\sin^2$  импульс шаклига эга бўлган лазер импульси учун бошланғич тизим сифатида  $Mo\ I$  ва  $Mo\ II$  учун олинган гармоника спектрлари 17-расмда кўрсатилган.  $Mo\ I$  (қора) ва  $Mo\ II$  (қизил) учун эгри чизиқлар асосан бир-бирининг устига тушади, чунки нейтрал  $Mo$  тез ионланиб,  $Mo\ II$  плазмасини ҳосил қилади.



**17-расм.** [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 195401 (2020) мақолада 7-расм] (а) Мо I (қора) ва Мо II (қизил) дан бошлаб ҳисобланган ЮГГ спектрлари. Мо II учун спектр музлатилган ядро билан 4р гача (очиқ кўк) ҳисобланган. (б) яқинлаштирилган тасвир.

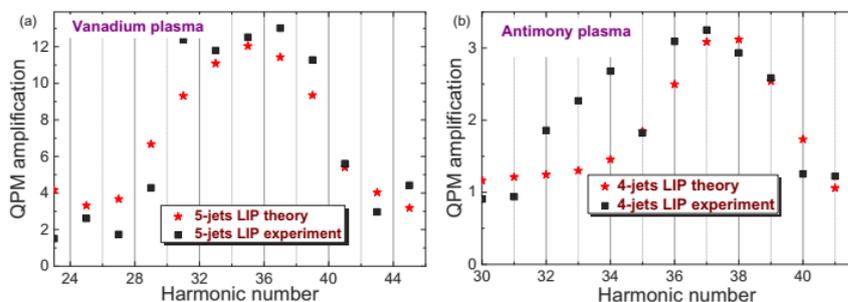
Биз 38 эВ (32,6 нм, ~Н25) атрофида яхшиланишни ва 33-34 эВ (~36-38 нм, ~Н21-Н22) атрофида бостиришни кўришимиз мумкин, улар қуйида 18-расмда муҳокама қилинган экспериментал хусусиятларни яхши акс эттиради. 17-расмда симуляцияда музлатилган ядро сифатида кўрилган 4р гача орбиталлар билан Мо II учун ҳисобланган спектр ҳам кўрсатилган (оч кўк). 4s ва 4р ни музлатиш иккала хусусиятнинг йўқолишига олиб келади, бу 4s ва/ёки 4р динамикаси улар билан боғлиқлигини англатади. ТСП (806 нм + 403 нм) шароитида Мо плазмасидан гармоникаларни ўзгартириш ва кучайтиришда 806 нм импульс энергиясини ҳаракатлантирувчи роли бўйича экспериментал натижалар 18 (а)-расмда кўрсатилган. Ҳаракатланувчи импульс энергиясининг 0,5 дан 1,3 мЖ гача ошиши Н2 нинг алмаштириш самарадорлигини оширишга ва уларни кузатишнинг бутун диапазони бўйлаб гармоника рентабелликнинг ўсишига олиб келди. DP энергиясининг ортиши билан кучайтирилган гармоникалар гуруҳининг пайдо бўлишига эътибор беринг. Қизиқарли кузатув Н25 ни Н26 билан солиштирганда кучлироқ бўлиб, у гармоника тартиби учун резонансдан келиб чиқадиган жараёни оптималлаштиришни кўрсатади, бу ҳаракатлантирувчи лазер майдони ва ҳатто гармоника (Н26) ўртасидаги оптимал фаза муносабатларига кўпроқ мос келади. Оптимал гармоника тартибнинг силжиши (Н25 дан Н26 га) мос равишда ТСП ва SCP ҳолатларида гармоник спектрларни кўрсатадиган 18 (а)-расмнинг иккита пастки панелини солиштирганда аниқ кўринади.



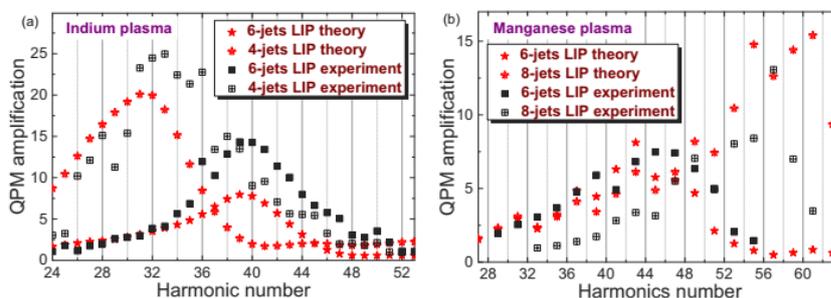
18-расм. [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 53, 195401 (2020) мақолада 4-расм] (a) Мо ЛХҚП нинг ТСП шартларида ДП нинг турли энергияларида гармоника спектрларнинг тарқалишининг боғлиқлиги (тўртта юқори панел). Пастки панелда SCP ҳолатида олинган спектр кўрсатилган.

Иккита жараённинг таққосланиши, резонанс гармоника ҳосил бўлиши ва квазифазали мослашув, натижада турли лазерли плазмалар (ванадий, сурма, индий ва марганец) орқали тарқалиш пайтида ултрақисқа импульсларнинг юқори тартибли гармоникалари кучаяди [Op. Continuum 1, 1098-1116 (2022)]. Мультиоқимли плазмаларда квазифазали мослашишда максимал даражада кучайтирилган гармоникаларнинг созланиши, резонансли кучайган гармоникаларнинг бир вақтнинг ўзида кучайтирилиши кўрсатилган. Тўрт босқичли модел ва квазифазали мослашиш (QPM) доирасида экспериментал кузатилган якка гармоника резонансини (SHE) қўллаб-қувватловчи назарий ҳисоб-китоблар, ЛХҚПдаги гармоника гуруҳининг SHE интерференция модели ва ғалаёнланмасдан ҳодисалар дан мустақил ёндашув амалга оширилди. Танланган доирада восита лазер майдони билан ўзаро таъсир қилувчи атомлар қатори сифатида тақдим этилган бўлиб, улар муҳитдаги атомнинг ҳолатига қараб параметрларга эга. Муҳитда тарқалиш туфайли лазер майдонининг параметрлари атомдан атомга ўзгаради. Алоҳида атомларнинг жавоби ғалаёнланмаслик назарияси (гармониканинг амплитудалари ва фазалари ва рақамли тажрибалардан олинган ЛХҚП чиқиши ичидаги атомларнинг ҳолатига боғлиқлиги) доирасида ҳисобланади. Муҳитнинг фотоэмиссиясининг умумий жавоби интерференция модели бўйича ҳисобланади (когерент ҳосил қилувчи эмиттерлар йиғиндиси сифатида). Лазер майдонларининг параметрлари (бир ва икки рангли лазер майдон компонентларининг интенсивлиги, уларнинг вақт бўйича кенглиги ва икки рангли лазер майдонларининг компонентлари орасидаги кечикиш вақтлари) ва плазма параметрлари (масалан, ЛХҚП оқимларининг кенглиги, уларнинг сони, плазмаларнинг зичлиги) экспериментал

маълумотларга мувофиқ танланган. Дисперсия туфайли ЛХҚПда тарқалиш жараёнида лазер майдонининг параметрлари ўзгаради. Плазманинг таъсири Лоренц назарияси томонидан ҳисобга олинади. Яратилган нурланишнинг реабсорбцияси ҳисобга олинмайди.



**19-расм.** [Opt. Continuum 1, 1098-1116 (2022) мақолада 6-расм] (а) Перфорирланган плазма (қизил юлдузлар) ҳолатида тақдим этилган ванадий плазмасида QPM резонансини ҳисоблаш. Таққослаш учун экспериментал ўлчанган QPM резонанси тақдим этилади (қора квадратлар). (б) Сурма плазмасида QPM резонансини ҳисоблаш. Таққослаш учун экспериментал ўлчанган QPM резонанси тақдим этилган (қора квадратчалар).



**20-расм.** [Opt. Continuum 1, 1098-1116 (2022) мақолада 7-расм] (а) Индий плазмасида QPM резонансини ҳисоблаш. Экспериментал ўлчанган QPM резонанси қора квадратлар ва қора очик кесишган квадратлар билан таққослаш учун тақдим этилади. (б) марганец плазмасида QPM резонансини ҳисоблаш. Экспериментал ўлчанган QPM резонанси қора квадратлар ва қора очик кесишган квадратлар билан таққослаш учун тақдим этилган. Сўнгида резонанс билан кучайган гармониканинг бир оз ўсишини барча ҳолатларда кузатиш имконини беради, марганец плазмасининг 8 та оқими ва индий плазмасининг ҳар иккала текширилган ҳолатлари бундан мустасно, чунки бу ҳолатлар учун максимал даражада кучайтирилган QPM гармоникаларининг позицияси плазманинг ушбу турлари учун "резонансли" гармоникалардан узоқда.

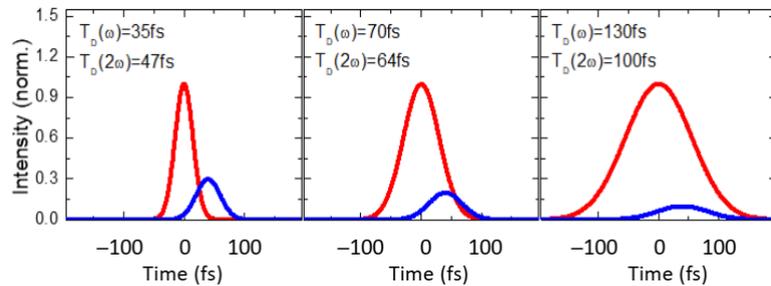
Тўртта ўрганилган плазмадаги гармоникаларнинг QPM кучайишининг рақамли ҳисоб-китоблари натижалари 19- ва 20 (юлдузлар билан кўрсатилган)-расмларда кўрсатилган. Экспериментал равишда ўлчанган QPM яхшиланишлари ҳам расмда кўрсатилган. Тўғридан-тўғри таққослаш учун 19- ва 20 (квадратчалар

билан кўрсатилган)-рамлар. Рақамли ҳисобланган ва экспериментал тарзда ўлчанган максимал даражада кучайтирилган гармоникаларнинг позициялари деярли бир-бирига тўғри келади. Бундан ташқари, QPM яхшиланишининг ҳисобланган қийматлари ҳам экспериментал ўлчанган қийматларга мос келади. Рақамли ҳисоб-китобларнинг натижалари QPM ва SHE таъсирини ажратиш имконини беради: барча ҳисобланган ҳолатларда QPM нинг резонанс кучайган гармоникага таъсири конструктивдир. Натижада, кўп ҳолларда ионлар сонининг камайиши "резонанс" гармоникаларининг QPM томонидан кўшилиши билан кўшимча равишда қопланади.

Таркибида углерод бўлган плазма гармоникалар генерациясини ҳосил қилиш учун жозибадор восита эканлиги исботланган. Углероднинг бошқа элементлар (карбидлар) билан баъзи бирикмалари иккита компонентнинг илғор нозикли оптик хусусиятларининг комбинациясига олиб келиши мумкин. Металл ва углерод (металл карбидлар) ўз ичига олган молекулалар, шунингдек, ЮГГ учун ишлатилиши мумкин ва турли усуллар билан, масалан, чирпланган импульсларни қўллаш, икки рангли дамлаш ва турли абласён усуллари билан таҳлил қилинади. Қизиқарли кўшимча вариант - бундай молекулаларни ўз ичига олган нанозаррачалардан фойдаланиш, чунки НЗлар гармоника генерациясини оширишни исботлади. [Nanomaterials 12, 4228. (2022)] мақолада SiC, B<sub>4</sub>C ва Cr<sub>3</sub>C<sub>2</sub> НЗс ўз ичига олган плазмаларда гармоника ҳосил бўлиши экспериментал равишда кўрсатилди. Ушбу ЛХҚПларда ЮГГ нинг турли параметрлари текширилди. Экспериментал маълумотларни таҳлил қилиш учун кучли майдон яқинлашувига асосланган ЮГГ нинг соддалаштирилган икки рангли дамлаш модели ҳисоб-китоблари ишлатилган.

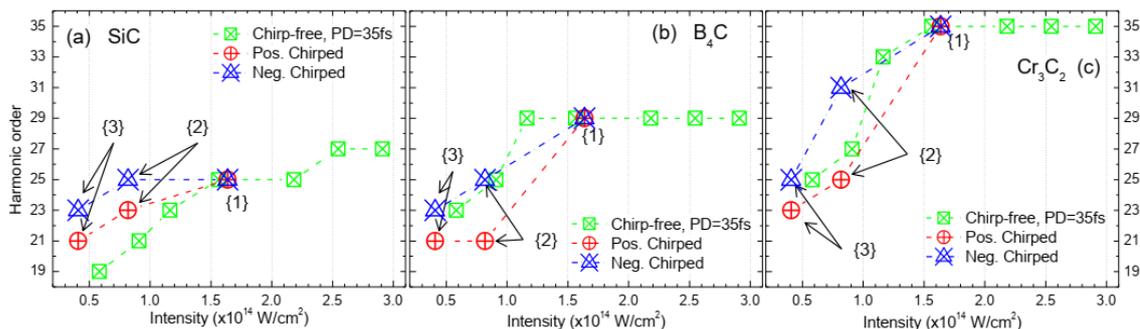
Импульс давомийлиги 35 фс бўлган чирпланмаган импульслардан мусбат/манфий чирпли импульсларга ўтиш CG ва HRR ўртасидаги масофани (14-расмга қаранг) носимметрик тарзда, импульснинг давомийлигини ўлчаш нуқтаи назаридан автокорреляция техникаси ёрдамида сошлаш орқали амалга оширилди. Лазер чирпининг ўзгариши пайтида импульс энергияси ўзгармади. Шундай қилиб, бизда бир хил 70 фс ва 130 фс импульс давомийликларига эга, аммо чирпининг қарама-қарши ишорали жуфт импульслар мавжуд. 21-расмда рақамлар билан аниқланган 70- ва 130-фс импульсларнинг чирпсиз ва чирпли вақтинчалик шакллариининг учта гуруҳи кўрсатилган. 22-расмда учта сенарийда экспериментал тарзда ўлчанган кесишган гармоника тартибларнинг таққосланиши кўрсатилган. Яшил кесиб ўтган квадратчалар билан чизилган биринчи сенарий - чирпсиз 35 фс импульс энергиясининг ўзгариши билан кесиш позициясининг ўзгариши. Импульснинг энергияси лазер кучайтиргичининг бошқариладиган дамлаши томонидан созланган (14-расмда PUMP ва AMP). Ҳар

бир материал учун белгиланган максимал интенсивликдан бошлаб, тўйинганлик таъсирини кўриш мумкин, РРни оширишда кесиш тартиби ошмайди.



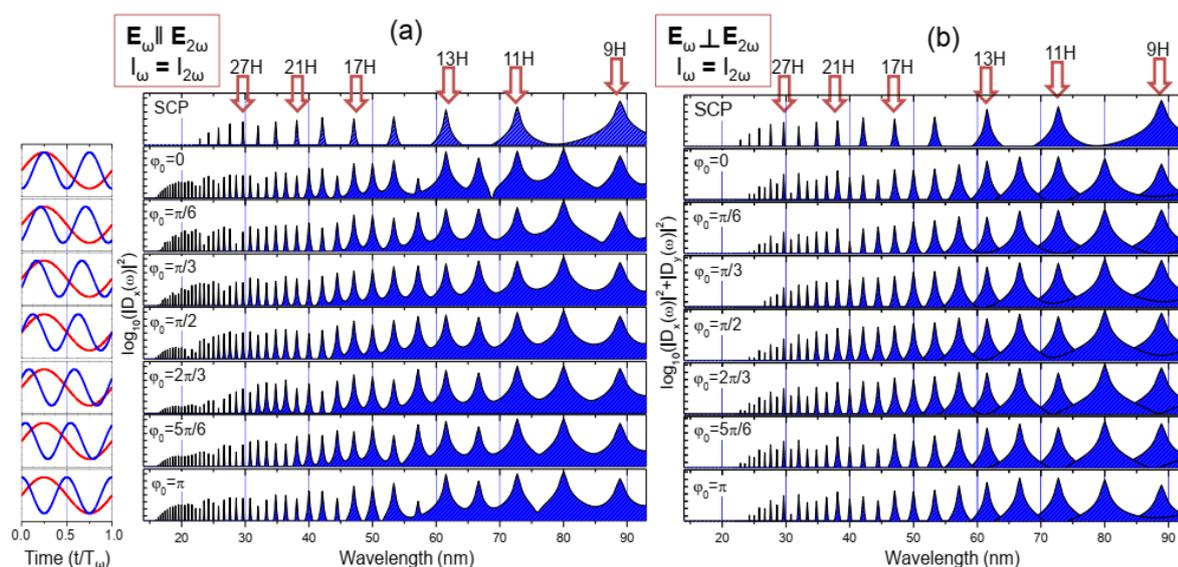
**21-расм.** [Nanomaterials 12, 4228. (2022) мақолада 3-расм] 0,2 мм қалинликдаги ББО кристаллидан ўтгандан сўнг асосий импульслар (қизил эгри) билан солиштирганда импульсларнинг моделлаштирилган кенгайиши ва SH импульсларининг нисбий вақт позициялари (кўк эгри). Яхшироқ кўриш учун SH нинг интенсивлиги 4 фактор билан оширилади.  $T_D(\omega)$  анд  $T_D(2\omega)$  - асосий ва SH импульслари учун импульснинг давомийлиги.

22-расмдаги қизил ва кўк кесишган белгилар билан чизилган бошқа иккита сенарий чирпининг ўзгариши ҳолатларида кесиш позициясининг боғлиқлигини кўрсатади. Қизил белгилар мусбат чирпнинг {1} → {3} нуқталари бўйича ортиши йўлига ва кўк - {1} → {3} нуқталари бўйича манфий чирпнинг ортиши йўлига мос келади. {2} ва {3} нуқта автокорреляция техникаси бўйича ўлчанган импульснинг давомийлиги бир хил, мос равишда 70 фс ва 130 фс бўлган, бироқ чирплашнинг қарама-қарши белгиларига эга бўлган чирп импульсларини белгилайди. {1} нуқта CG ва HRR ўртасидаги масофани сошлаш орқали қизил ва кўк эгри чизиклар чирпларсиз 35 фс пулсга эришадиган умумий нуқталарни билдиради.



**22-расм.** [Nanomaterials 12, 4228. (2022) мақолада 5-расм] (а) SiC, (б) B<sub>4</sub>C ва (с) Cr<sub>3</sub>C<sub>2</sub> НЗ плазмалари учун турли хил РР интенсивликдаги 35 фс импульслар (кесишган) учун кесишиш ҳолатига боғлиқликлари (яшил квадратлар), мусбат чирпли импульслар (кесилган қизил доиралар) ва манфий чирпли импульслар (кесилган кўк учбурчаклар). {2} ва {3} нуқта бир хил импульс давомийликлари, мос равишда 70 фс ва 130 фс бўлган, лекин қарама-қарши чирп ишораларига эга бўлган чирпли импульсларни белгилайди. {1} нуқта CG ва HRR ўртасидаги масофани сошлаш орқали қизил ва кўк эгри чизиклар чирпларсиз 35 фс импульсга эришадиган умумий нуқталарни белгилайди (14-расмга қаранг).

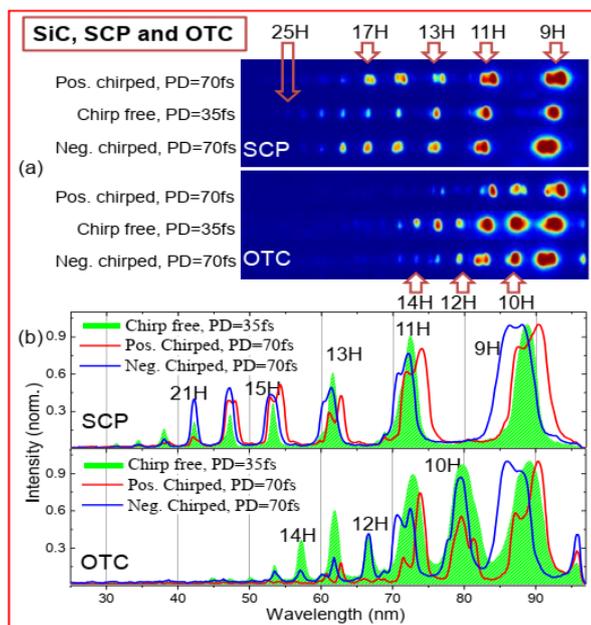
Барча учта материал учун дастлабки нуқта {1}  $PP = 1,65 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup> танланади. {1} → {3} йўллари бўйлаб импульс энергияси ўзгармади. В<sub>4</sub>С ва Cr<sub>3</sub>С<sub>2</sub> НЗларида (22b,c-расм) бошланғич интенсивлик нуқтаси {1} тўйинганлик диапазолига яқин ёки унинг ичига жойлаштирилади ва биз чирпсиз (яшил кесиб ўтган квадратчалар) ва манфий чирпли йўллар учун умумий ҳаракатни чирпнинг мусбат ишораси бўйлаб ҳаракатланаётганда, йўл кесиш ҳолатини қисқартиришини кўришимиз мумкин. SiC НЗлар ҳолатида (22a-расм) бошланғич нуқтаси {1} тўйинганлик интенсивлигидан пастрокда жойлашган. Манфий/мусбат чирп йўллари шунга ўхшаш нақшни кўрсада-да, чирпсиз йўлнинг нисбий позицияси ўзгартирилди.  $I_p$  ва  $I_\omega$  қийматлари экспериментал натижаларга мос келадиган 24-расмда келтирилган SiC ЛХҚП нинг ЮГГ ҳисоблаш натижаларини кўрсатилган.



**23-расм.** [Nanomaterials 12, 4228. (2022) мақолада 6-расм] РТС (а) ва ОТС (б) учун ҳисобланган ЮГГ спектрлари.  $\phi_0$  биринчи устунда қизил (800 нм) ва кўк рангли (400 нм) чизиқлар билан схематик тарзда тақдим этилган  $\omega$ - $2\omega$  майдонлари учун нисбий фаза силжишини билдиради.  $\omega$  ва  $2\omega$  нинг интенсивликлари тенг, поляризация векторларининг йўналиши (а) панелда параллел ва (б) панел учун ортогонал. Юқори панеллар (SCP) ҳисобланган ЮГГ ни фақат 800 нм майдон билан тақдим этади.

$I_p$  ионланиш потенциали  $I_\omega = 1.65 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup> учун чиқарилди ва 22a-расмдаги кесиш позицияси  $I_p = 9$  эВ га тўғри келди. Ҳисоб-китоблар  $\omega$  ва  $2\omega$  майдонларининг тенг интенсивлиги ( $I_\omega = I_{2\omega}$ ), уларнинг қутбланишлари ортогонал ёки бир-бирига параллел бўлган ҳолда тақдим этилади. Соддалик учун  $E_\omega$  ҳар доим  $x$  ўқи бўйлаб,  $E_{2\omega}$  эса  $x$  ўқи ёки  $y$  ўқи бўйлаб йўналтирилган. Таққослаш учун 800 нм дамлаш юқори тартибли ЮГГ спектрлари билан тақдим этилган (23-расм, SCP). Ҳар хил фаза силжиши  $\phi_0$  бўлган гармоника спектрлар

$\pi/6$  қадам билан 0 ва  $\pi$  оралиғида тақдим этилади.  $\omega$  ва  $2\omega$  майдонларининг мос келадиган профиллари 23-расмнинг биринчи устунида асосий майдон учун ягона давр вақт оралиғида қизил ва кўк рангли яхлит чизиқлар билан кўрсатилган. РТС ҳолатида (23а-расм) фақат  $D_x$  компоненти нолга тенг эмас, ОТС учун (23б-расм) иккита компонент давом этади,  $D_x$  ва  $D_y$ . Шунга мос равишда, олинган ЮГГ спектрлари  $|D_x|^2 + |D_y|^2$  йиғиндисининг логарифмлари сифатида тақдим этилади. Иккинчи майдоннинг бир вақтнинг ўзида мавжудлиги иккала йўналиш учун гармониканинг барча жуфт ва тоқ тартиблари пайдо бўлишига олиб келади. Ҳисоб-китоблар  $E_\omega$  ва  $E_{2\omega}$  векторларининг ориентацияси муҳимлигини кўрсатади. РТС учун кесиш позициясининг 27-чи тартибдан 41-43-чи тартибларга кўтарилганини кўриш мумкин, кесиш вазиятидан ташқари режимда эса плато охирида баъзи интенсивлик модуляциялари билан кесиш позицияси ўзгаришсиз қолади.  $\phi_0$  нинг ўзгариши платонинг чегара ҳудудида гармоника интенсивликларнинг модуляциясига олиб келади (23а-расмда РТС учун  $\phi_0 = \pi/2$  дан  $\phi_0 = 5\pi/6$  гача ҳолатда). Ҳақиқий тажрибаларда буни кесишнинг ўзгариши сифатида кузатиш мумкин. Худди шундай минимал кесишдан ташқари қиймат учун ҳам кузатилади (23б-расм,  $\phi_0 = \pi/3$ ).



**24-расм.** [Nanomaterials 12, 4228. (2022) мақолада 7-расм] ЮГГ чирпланган ва чирпсиз SCP ва ОТС билан SiC НЗ ЛХҚПлари. (а) панел 0,2 мм қалинликдаги ВВО кристалидан фойдаланган ҳолда SCP ва ОТС учун ишлов берилмаган МСР тасвирларини кўрсатади. (б) панеллар мос келадиган тасвирлар учун профил участкаларини тақдим этади.

24-расмда SiC ЛХҚПларни чирпсиз ва чирпли импульслар ёрдамида текшириш пайтида гармоника спектрлари келтирилган. Панеллардаги яшил ранг билан тўлдирилган профиллар (24б-расм) SCP ва ОТС конфигурацияларида 35 фс импульс давомийлиги ва  $I_\omega = 1.65 \times 10^{14}$  Вт см<sup>-2</sup> бўлган чирпсиз импульсларга мос келади. Биз SH импульсларининг интенсивлигини  $I_\omega = 9 \times 10^{12}$  Вт см<sup>-2</sup> деб ҳисобладик. Энг кўзга ташланадиган ўзига хослик - бу ОТС дамлашининг кесиш ҳолатининг кучли қисқариши. SiC НЗ ЛХҚП ҳолатида, нисбатан кичик SH интенсивлигига қарамай, у 25H дан 15-16H гача кўчди. Тенг  $\omega$  ва  $2\omega$  майдонлари

учун модел ҳисоб-китоблари (23б-расм) бундай ҳодисаларни башорат қилмайди. Модел ҳисоб-китоблари учун интенсивлик нисбатлари асосий 800 нм ва SH учун импульс энергияси ва давомийлиги ўлчовлари ёрдамида аниқланди. Фазалар фарқи аниқ ўлчанмади, лекин бунинг ўрнига чирпсиз импульслар ҳолатида соддалаштирилган модел ёрдамида ЮГГ спектрларининг ўзгаришлари моделлаштирилди. Тажрибада, чирпсиз импульслар ҳолатида кесишнинг қисқариши кузатилди. Икки тўлқиннинг энг кучли ўзаро таъсири кутилганда, бу жараён тенг  $\omega$  ва  $2\omega$  интенсивлигида ҳам башорат қилинмаган.  $\pi/3$  атрофидаги фазалар фарқи учун кесишишнинг бироз қисқариши тахмин қилинади.

## ХУЛОСАЛАР

Бу ерда тақдим этилган назарий тадқиқотлар экспериментал тадқиқотлар натижасида олинган маълумотлар ва КМЯ асосидаги назарий ҳисоблар ёки TDSE билан тўғридан-тўғри сонли ҳисоблар билан чамбарчас боғлиқ. Ионизация ҳам, ЮГГ ҳам экспериментларнинг асосий хусусиятларини етарли даражада акс эттирган ҳолда КМЯга асосланган ёндашувнинг мустаҳкамлиги ва мослашувчанлигини намойиш этди. Бундан фарқли ўлароқ, TDSE нинг тўғридан-тўғри рақамли ечими ҳали ҳам етарлича вақт талаб қиладиган процедура ҳисобланади.

Асосий хулосалар қуйидагилардан иборат:

1.  $N_2$  ва  $O_2$  ва уларнинг ўхшаш атомлари Ar ва Xe билан солиштирганда лазер билан нурланган  $F_2$  диатомик молекуласида кучли майдонли ионланиш жараёни одатий КМЯ нинг тезлик ўлчагич версияси доирасида кўриб чиқилди. Мавжуд экспериментал маълумотларга кўра,  $N_2$  ва Ar га нисбатан  $F_2$  ионланишида бостирилишнинг йўқлиги ҳодисасининг тавсифи олинди.
2. Реакция наноскопия ёрдамида олинган протон импульсидан аерозол оқимидаги якка нанозаррачалар ва уларнинг кластерлари характеристикалари сифатида фойдаланиш мумкин. Кластер сигналлари паст интенсивликдаги битта нанозаррача сигналлари устидан устунлик қилиши экспериментал тарзда кўрсатилди ва рақамли ҳисоб-китоблар билан тасдиқланди, бу кремний диоксиди нанозаррачаларидан электрон эмиссия чегараси бўйича олдинги экспериментал маълумотлар ўртасидаги номувофикликлар учун мос тушунтиришни таклиф қилади.
3. Интенсивлиги юқори қисқа лазер импульслари билан  $SiO_2$  нанозаррачалари юзасини нурлантирганда  $H_3^+/D_3^+$  ионларини ҳосил қилиш орқали мураккаб ва ноёб молекуляр динамикани намойиш этди. Натижалар интенсив фемтосекундли лазер майдонларида экзотик кимёвий реакциялар учун катализатор сифатида нанозаррачаларнинг характеристикасининг аниқ намойишини таклиф қилади.

4. Li, Li<sup>+</sup>, Al ва Al<sup>+</sup> мисолларида атом ЛХҚПлари учун ЮГГ спектрларининг батафсил КМЯ ҳисоб-китоблари экспериментал натижалар билан яхши мувофиқлигини кўрсатди. ЛХҚПларда бир зарядланган ионларнинг роли микроскопик нуқтаи назардан тушунтирилди.

5. Молекуляр ЮГГ тавсифи учун Гаусс аниқ модели ГЕХнинг тақдим этилган умумлаштирилиши КМЯ ЮГГ нинг тўлиқ аналитик ифодаланишига имкон берди. ХОМО симметрияси туфайли ЮГГ спектрларининг ўзига хос хусусиятлари, жумладан, минимал минтақа атрофидаги гармоникаларнинг қутбланиш хусусиятлари H<sub>2</sub> ва H<sub>2</sub><sup>+</sup> молекулалари мисолида кўрсатилди.

6. Асосий нурланиш ва унинг иккинчи гармоникаси билан ортогонал-поляризацияланган дамлаш схемаси Ag нинг ЮГГ спектрларида Купер минимумини (КМ) ўрганиш учун қўлланилди. Фазаларни мослаштириш ёки газ оқими ўрнини ўзгартириш орқали КМни макроскопик назорат қилиш кўрсатилди.

7. Ҳажмий нишон сиртида плазма оқими сонини ўзгартириш орқали иккита жараён: резонанс кучайтириш ва квазифазали мослашиш комбинациясида ЮГГ спектрини бошқариш экспериментал намойиш қилинди ва назарий тушунтирилди.

8. SiC, B<sub>4</sub>C ва Cr<sub>3</sub>C<sub>2</sub> нанозаррачалари билан карбидни ўз ичига олган ЛХҚПларда ЮГГ ни назорат қилиш ва созлаш учун чирпланган импульсли икки рангли ортогонал дамлаш схемаси ишлатилди. Назарий КМЯ ҳисоб-китоблари дамлаш майдонларида поляризация йўналишларининг роли тушунтирилди.

### **Миннатдорчилик:**

Мен илмий раҳбарим профессор Рашид Ганеевга беш йилдан ортиқ ҳамкорликда доимий ва бебаҳо ёрдами ва кўрсатмалари учун миннатдорчилик билдирмоқчиман. Физика-математика фанлари доктори Ганжабой Болтаевга ҳамкорликдаги экспериментал тадқиқотларни ўтказишга қўшган ҳиссаси учун алоҳида раҳмат. Физика-математика фанлари докторлари Иля Кулагин ва Владимир Усаченкога назарий ҳисоб-китобларни қўллаб-қувватлаганликлари учун миннатдорчилик билдирмоқчиман. Бундан ташқари профессор Чунлеи Гуо (СИОМР, Хитой) ва профессор Али Алнасерга (AUS, БАА) лазер лабораторияларида экспериментал қурилмалар билан ишлашга рухсат берганликлари учун миннатдорчилик билдираман. Ваниҳоят, PhD диссертациясининг натижаларини тақдим этишимга рухсат бергани учун профессор Бобомурат Аҳмедов ва унинг ФАТИдаги жамоасига алоҳида миннатдорчилик билдираман.



**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc.03/31.03.2022.T/FM.10.04 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ  
УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ ИНСТИТУТЕ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И  
ПРИКЛАДНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ, “ТИИИМСХ” НАЦИОНАЛЬНЫЙ  
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ**

---

**ИНСТИТУТ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ И ПРИКЛАДНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ**

**КИМ ВЯЧЕСЛАВ ВАЛЕНТИНОВИЧ**

**ИССЛЕДОВАНИЕ ИОНИЗАЦИИ И ГЕНЕРАЦИИ ВЫСШИХ ГАРМОНИК  
СВЕРХКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ В ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЕ**

**01.04.02 – Теоретическая физика  
(физико-математические науки)**

**ПРЕДСТАВЛЕНИЕ**

**по присуждению ученой степени доктора философии (PhD)  
на основе научных публикаций без защиты диссертации**

**Ташкент – 2023**

Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Министерстве высшего образования, науки и инноваций Республики Узбекистан под номером B2023.2.PhD/FM859.

Результаты исследований выполнены в Институте фундаментальных и прикладных исследований Национального исследовательского университета «ТИИИМСХ».

Представление научного исследования на трех языках (узбекском, английском и русском (резюме)) размещен на сайтах Ученого совета ([www.ifar.uz](http://www.ifar.uz)), Национального информационного агентства ([www.uza.uz](http://www.uza.uz)) и Информационно-образовательном портале «Ziyonet» ([www.ziyonet.uz](http://www.ziyonet.uz)).

**Научный консультанты:**

**Ганеев Рашид Аширович**

доктор физико-математических наук, профессор,  
Латвийский университет, Рига, Латвия

Защита представления состоится «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 года в \_\_\_ часов на заседании Ученого совета № DSc.03/31.03.2022.T/FM.10.04 при Институте фундаментальных и прикладных исследований, Национальной Исследовательский университет «ТИИИМСХ». Адрес: 100000, г.Ташкент, ул. Кори Ниязова 39, тел.: 71 237-09-61.; e-mail: [info@ifar.uz](mailto:info@ifar.uz).

Представления зарегистрирована в Информационно-ресурсном центре Института фундаментальных и прикладных исследований при Национальной Исследовательский университет «ТИИИМСХ» (регистрационный номер \_\_\_\_). С диссертацией можно ознакомиться в Библиотеке университета «ТИИИМСХ». Адрес: 100000, г.Ташкент, ул. Кори Ниязова 39, тел.: 71 237-09-62.

Представления разослана «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2023 г.  
(протокол рассылки № 49 от \_\_\_ \_\_\_\_\_ 2023 г.).

**Б.Ж. Ахмедов**

председатель Научного совета по присуждению  
ученых степеней, д.ф.-м.н., профессор

**Э.Х. Каримбаев**

ученый секретарь Научного совета по присуждению  
ученых степеней, PhD ф.-м.н.

## **ВВЕДЕНИЕ (Аннотация к представлению)**

**Целью исследования** является как теоретическое, так и экспериментальное исследование процессов ионизации и генерации высших гармоник в лазерно-индуцированных плазме и газах с использованием ультракоротких лазерных импульсов. Теоретический и экспериментальный анализ генерации высших гармоник с использованием одно- и двухцветной накачки лазерно-индуцированной плазмы для достижения генерации гармоник с резонансным усилением и квазисинхронизмом (КС).

**Задачами исследования** являются изучение динамики ионизации в молекулах и на поверхности наночастиц при облучении короткими и ультракороткими лазерными импульсами;

Исследование нелинейно-оптических свойств газов и различных лазерно-индуцированных плазм;

Исследование резонансной генерации высших гармоник (ГВГ) и процессов спектральной перестройки с применением многоструйных плазм;

Исследование механизмов ГВГ с двухцветными схемами накачки и с использованием chirpированных лазерных импульсов;

Использование содержащих наночастицы лазерно-индуцированной плазмы (ЛИП) для ГВГ.

**Объектом исследования** является лазерно-индуцированная плазма из простых атомарных и сложных молекулярных мишеней, плазма, содержащая наночастицы и газовые струи.

**Предметом исследования** являются свойства и характеристики времяпролетных спектров, нелинейно-оптические свойства высоких порядков материалов мишеней и спектральные характеристики генерируемых высших гармоник.

**Методы исследования** включают как теоретические, так и экспериментальные. Теоретические методы включают моделирование с использованием аналитических моделей, полученных в рамках приближения сильного поля, и численное интегрирование нестационарных уравнений Шрёдингера. К экспериментальным методам относятся исследование ГВГ в газах или формирование путем нагрева лазерным импульсом лазерно-индуцированной плазмы с короткими и ультракороткими накачивающими импульсами в условиях высокого вакуума. Выход ионов и распределение импульсов продуктов ионизации исследуется с использованием метода реакционной наноскопии. Эмиссия ГВГ регистрируется методом XUV-спектроскопии.

## Научная новизна исследования

Показано, что распределения импульсов протонов, полученные методом реакционной наноскопии, специфичны для одиночных наночастиц и их кластеров в аэрозольном потоке. Впервые было продемонстрировано, что ионизация с поверхности кластеров доминирует над ионизацией с одиночных наночастиц при низких интенсивностях, что предлагает адекватное объяснение расхождению между предыдущими экспериментальными данными об эмиссии с поверхности наночастиц  $\text{SiO}_2$ .

Впервые были представлены результаты, раскрывающие сложную и уникальную молекулярную динамику молекул  $\text{H}_2\text{O}/\text{D}_2\text{O}$ , адсорбированных на поверхности наночастиц  $\text{SiO}_2$  с образованием ионов  $\text{H}_3^+/\text{D}_3^+$ . Результаты однозначно демонстрируют характеристику наночастиц как катализаторов экзотических химических реакций в интенсивных фемтосекундных лазерных полях.

Впервые проведены детальные расчеты спектров ГВГ для  $\text{Li}$ ,  $\text{Li}^+$  LIP в приближении сильного поля (SFA), обнаружено хорошее совпадение с экспериментальными результатами и сделаны выводы о роли ионов  $\text{Li}^+$ , обладающих наибольшей второй энергией ионизации, в расширении отсечки ГВГ.

Впервые для алюминиевых Al LIP было продемонстрировано, что наличие сильных линий ионной эмиссии в XUV-диапазоне не влияет на выход спектрально близких гармоник. В случае плазмы с наночастицами Al продемонстрирован 5-кратный рост выхода гармоник. Представлены расчеты SFA и показано, что положение отсечки связано с вкладом нейтральных атомов Al, а не  $\text{Al}^+$ .

Сформулировано обобщение точной модели Гаусса (GEX) для описания ГВГ, которое позволило полностью аналитическое представление ГВГ для молекул без использования метода перевала. На примере молекул  $\text{H}_2$  и  $\text{H}_2^+$  показано влияние симметрии высшей занятой молекулярной орбитали (НОМО) на особенности спектров ГВГ, в том числе на поляризационные свойства гармоник в области минимумов.

Продемонстрированы контроль куперовского минимума (CM) в спектрах ГВГ, генерируемых при взаимодействии газа Ar с лазерными импульсами с длиной волны 1030 нм, длительностью 35 фс и при использовании ортогонально поляризованных полей основного излучения и его второй гармоники.

Резонансное усиление гармоник в области 32 нм во время ГВГ в плазме молибдена Mo проанализировано как численно, так и экспериментально.

Сравнение резонансного усиления и квазисинхронизма при одновременной комбинацией обоих процессов представлено и исследовано теоретически и экспериментально.

Впервые представлены исследования карбидосодержащих ЛИП с наночастицами SiC, B<sub>4</sub>C и Cr<sub>3</sub>C<sub>2</sub> как сред для генерации высших гармоник при одноцветной накачке и ортогонально-поляризованной двухцветной накачке с chirпированными и спектрально-ограниченными импульсами. Теоретические расчеты в приближении SFA продемонстрировали роль взаимной ориентаций поляризации в двухцветной накачке.

**Практические результаты исследования** заключаются в следующем. Теоретические и экспериментальные результаты были использованы при усовершенствовании конструкции установки для ГВГ в Американском университете Шарджи (ОАЭ). Разработаны различные программные коды для расчета ГВГ и обработки экспериментальных данных, которые в настоящее время активно применяются в научных группах Чанчуньского института оптики, физики и точной механики (Китай), Американского университета Шарджи (ОАЭ) и лаборатории нелинейной оптики Университета Латвии (Латвия).

**Достоверность результатов исследований подтверждается** тем, что они получены с использованием современных расчетно-экспериментальных методик. Достоверность результатов также основана на совместимости полученных результатов с экспериментальными данными. Кроме того, для чтобы еще больше подчеркнуть надежность полученных результатов, все статьи PhD кандидата были рецензированы экспертами в области нелинейной оптики и опубликованы в высокорейтинговых журналах, отнесенных к квартилям Q1 и Q2.

**Научная и практическая значимость результатов исследования** Теоретические и экспериментальные результаты исследований, посвященных изучению явлений ионизации в сильных лазерных полях, способствуют развитию фотокатализа и фотохимии на поверхности наночастиц, что открывает пути к получению экзотических молекулярных образований нетрадиционными способами. Результаты исследований, посвященных ГВГ, способствуют лучшему пониманию нелинейно-оптических процессов высокого порядка и практической помощи в разработке когерентных источников света в XUV-диапазоне спектра. Эта работа важна для оптической визуализации наноразмерных и субклеточных систем, оптической литографии и мониторинга движения электронов в атомах, молекулах и наноструктурированных системах в аттосекундном масштабе времени.

**Внедрение результатов исследования.** Полученные результаты исследований суммарно были использованы более чем в 50 научных статьях, в

частности - исследования контроля Куперовского минимума в спектрах ГВГ были использованы 4 раза (Т.-Ф. Jiang, J. Phys. B 55, 075601; G.S. Boltaev, M. Iqbal, N.A. Abbasi et al, Sci. Rep. 11, 5534; К.М. Dorney, Т. Fan, Q.L.D. Nguyen et. al, Optics Express 29, 38119; R. Rajpoot, A.R. Holkundkar, J.N. Bandyopadhyay, J. Phys. B 53, 205404), аномального формирования катионов  $H_3^+$  с поверхности наночастиц 5 раз (J. Wang, Q. Qu, F. Sun, et al, Optics Express, 31, 9678; V. Ialyshev, G. Boltaev, M Iqbal et al, ACS Omega 7, 28182; H. Li, X. Gong, H. Ni, Journal of Physical Chemistry Letters 13, 5881 и др.), резонансное усиление в плазме молибдена – 8 раз (M. Venkatesh, V.V. Kim, G.S. Boltaev, et al, International Journal of Molecular Sciences 24, 6540; W. Fu, Y.H. Lai, W. Li, Optics Express 30, 47315 и др.), результаты по подавлению ионизации в молекулярных газах использовались 15 раз (J.E. Szekely, T. Seideman, Physical Review Letters, 129, 183201; M.C. Stroe, M. Fifirig, Optik, 224, 165612; Y. Chen, B. Zhang, J. Phys. B 45, 215601 и др.), сравнительное исследование ГВГ в Ar и различных ЛИП плазмах использовалось 9 раз (R.A. Ganeev, Applied Physics B 129, 17; V.V. Kim, I.A. Shuklov, A.A. Mardini, et al, Nanomaterials 12, 1264; D. Goldberger, D. Schmidt, J. Barolak, Optics Express, 29, 32474) и т.п.

**Опубликованность результатов исследования.** По теме диссертации опубликовано 15 научных статей в международных журналах с высокими импакт-фактором и рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов докторских диссертаций.

### **ЗАКЛЮЧЕНИЕ.**

Представленные здесь публикации тесно связаны с экспериментальными и теоретическими результатами на основе приближения сильных полей (SFA, strong-field approximation) и расчетами методом численного решения времязависимого уравнения Шредингера (TDSE, time-dependent Schrödinger equation). На примере расчетов для ионизации в сильных лазерных полях и процессов генерации высших гармоник (HHG, high-order harmonics) были продемонстрированы сила и гибкость подхода на основе SFA, были адекватно воспроизведены ключевые особенности экспериментальных результатов. Напротив, прямое численное решение методом TDSE по-прежнему является достаточно трудоемкой процедурой.

### **Основные выводы:**

1. Процесс ионизации в облученной лазером двухатомной молекуле  $F_2$  по сравнению с  $N_2$  и  $O_2$  и их аналогами атомами Ar и Xe рассматривался в рамках SFA в калибровке скорости. Получено адекватное существующим экспериментальным данным описание явления отсутствия подавления ионизации  $F_2$  по отношению к  $N_2$  и Ar.

2. Распределения импульса протонов, полученные с помощью reaction nanoscopy, могут быть использованы в определении одиночных наночастиц и их кластеров в аэрозольном потоке. Экспериментально было продемонстрировано и подтверждено численными расчетами, что ионизация с поверхности кластеров доминирует над ионизацией с одиночных наночастиц при низких интенсивностях, что дает объяснение расхождениям с предыдущими экспериментальными данными по электронной эмиссии наночастицами  $\text{SiO}_2$ .

3. Поверхность наночастиц  $\text{SiO}_2$ , облученных интенсивными короткими лазерными импульсами, продемонстрировала сложную и уникальную молекулярную динамику с образованием ионов  $\text{H}_3^+/\text{D}_3^+$ . Результаты однозначно характеризуют наночастицы как катализаторы экзотических химических реакций в интенсивных фемтосекундных лазерных полях.

4. Детальные SFA-расчеты спектров HHG для атомарной лазерно-индуцированной плазмы (LIP, laser-induced plasma) на примерах  $\text{Li}$ ,  $\text{Li}^+$ ,  $\text{Al}$  и  $\text{Al}^+$  показали хорошее согласие с экспериментальными результатами. Роль однозарядных ионов в LIP была объяснена с микроскопической точки зрения.

5. Представленное обобщение точной модели Гаусса (GEX, Gaussian exact model) для описания молекулярного HHG позволило представить полностью аналитическое представление формул для HHG в приближении SFA. Особенности спектров HHG, обусловленные симметриями НОМО (highest occupied molecular orbital), в том числе поляризационные свойства высших гармоник в области минимумов, были продемонстрированы в случае молекул  $\text{H}_2$  и  $\text{H}_2^+$ .

6. Для исследования куперовского минимума (CM, Cooper minimum) в спектрах HHG Ar была применена ортогонально-поляризованная схема накачки основным излучением и его второй гармоникой. Продemonстрировано макроскопическое управление CM за счет фазового синхронизма или изменения положения газовой струи.

7. Экспериментально продемонстрирован и теоретически описан спектральный контроль HHG в сочетании двух процессов: резонансного усиления и квазисинхронизма путем изменения количества плазменных факелов на поверхности мишени.

8. Двухцветная ортогональная схема накачки с чирпированными импульсами была использована для контроля HHG в карбидосодержащих LIP с наночастицами  $\text{SiC}$ ,  $\text{B}_4\text{C}$  и  $\text{Cr}_3\text{C}_2$ . Теоретические расчеты в приближении SFA были использованы для описания эффектов в зависимости от направления поляризации в полях лазерной накачки.

**ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ**  
**LIST OF PUBLISHED WORKS**  
**СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ**

**Бўлим I (part I; часть I)**

1. V.I. Usachenko, P.E. Pyak and V.V. Kim, "Comparative study of strong-field ionization in laser-irradiated F<sub>2</sub> molecule and other diatomic molecules: the DFT-based molecular strong-field approximation," *Phys. Rev. A* **79**, 023415 (2009) // DOI: 10.1103/PhysRevA.79.023415
2. P. Rosenberger, P. Rupp, R. Ali, M.S. Alghabra, S. Sun, S. Mitra, S.A. Khan, R. Dagar, V. Kim, M. Iqbal, J. Schötz, Q. Liu, S.K. Sundaram, J. Kredel, M. Gallei, C. Costa-Vera, B. Bergues, A.S. Alnaser and M.F. Kling, "Near-Field Induced Reaction Yields from Nanoparticle Clusters," *ACS Photonics* **7**, 1885-1892 (2020) // DOI: 10.1021/acsp Photonics.0c00823
3. M.S. Alghabra, R. Ali, V. Kim et al., "Anomalous formation of trihydrogen cations from water on nanoparticles," *Nat Commun* **12**, 3839 (2021) // DOI: 10.1038/s41467-021-24175-9

**Бўлим II (part II; часть II)**

1. V.V. Kim, R.A. Ganeev, G.S. Boltaev, M. Iqbal, A.S. Alnaser, "Calculation of high-order harmonic generation in laser-produced lithium plasma," *Opt. Lett.* **44**, 3693-3696 (2019) // DOI: 10.1364/OL.44.003693
2. V.V. Kim, D.S. Ivanov, R.A. Ganeev, M. Venkatesh, G.S. Boltaev, M.E. Garcia, B. Rethfeld and C. Guo, "Aluminum nanoparticle plasma formation for high-order harmonic generation," *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **52**, 245601 (2019) // DOI: 10.1088/1361-6455/ab4cc3
3. V.V. Kim, R.A. Ganeev, G.S. Boltaev, A.S. Alnaser, "Orientation dependences of high-order harmonic generation in H<sub>2</sub> and H<sub>2</sub><sup>+</sup> molecules," *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **53**, 155405 (2020) // DOI: 10.1088/1361-6455/ab94c8
4. R.A. Ganeev, G.S. Boltaev, V.V. Kim, M. Venkatesh and C. Guo, "Comparison studies of high-order harmonic generation in argon gas and different laser-produced plasmas," *OSA Continuum* **2**, 2381-2390 (2019) // DOI: 10.1364/OSAC.2.002381

**Бўлим III (part III; часть III)**

1. G.S. Boltaev, R.A. Ganeev, N.A. Abbasi, M. Iqbal, V.V. Kim, H. Al-Harmi, X.M. Tong and A.S. Alnaser, "Routes to control Cooper minimum in high order harmonics generated in argon gas," *New J. Phys.* **22**, 083031 (2020) // DOI: 10.1088/1367-2630/aba1b1

2. V.V. Kim, G.S. Boltaev, M. Iqbal, N.A. Abbasi, H. Al-Harmi, I.S. Wahyutama, T. Sato, K.L. Ishikawa, R.A. Ganeev and A.S. Alnaser, "Resonance enhancement of harmonics in the vicinity of 32 nm spectral range during propagation of femtosecond pulses through the molybdenum plasma," J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **53**, 195401 (2020) // DOI: 10.1088/1361-6455/aba581
3. R.A. Ganeev, V.V. Kim, G.S. Boltaev, I.B. Sapaev, and S.Y. Stremoukhov, "Joint manifestation of quasi-phase-matching and resonance enhancement of harmonics in laser-induced plasmas," Opt. Continuum **1**, 1098-1116 (2022) // DOI: 10.1364/OPTCON.454617
4. R.A. Ganeev, G.S. Boltaev, V.V. Kim, P.V. Redkin and C. Guo, "High-order harmonics generation under quasi-phase matched conditions in silver, boron, and silver sulfide plasmas of different configurations," Journal of Applied Physics **125**, 153101 (2019) // DOI: 10.1063/1.5089223
5. V.V. Kim, S.R. Konda, W. Yu, W. Li, R.A. Ganeev, "Harmonics Generation in the Laser-Induced Plasmas of Metal and Semiconductor Carbide Nanoparticles," Nanomaterials **12**, 4228. (2022) // DOI: 10.3390/nano12234228
6. R.A. Ganeev, V.V. Kim, K.S. Rao, C. Guo, "Probing Laser Plasma Dynamics Using High-Order Harmonics Generation in Carbon-Containing Nanomaterials," Appl. Sci. **11**, 2143 (2021) // DOI: 10.3390/app11052143
7. V.V. Kim, R.A. Ganeev, S.R. Konda, et al. "High-order harmonics generation in the laser-induced lead-free perovskites-containing plasmas," Sci Rep **12**, 9128 (2022) // DOI: 10.1038/s41598-022-13010-w
8. S. R. Konda, R. A. Ganeev, V. V. Kim, Y. Jiaqi, and W. Li, "High-order harmonics generation in nanosecond-pulses-induced plasma containing Ni-doped CsPbBr<sub>3</sub> perovskite nanocrystals using chirp-free and chirped femtosecond pulses," Nanotechnology **34**, 055705 (2022) // DOI: 10.1088/1361-6528/ac9fd

"Fan va innovatsiyalar" xalqaro ilmiy jurnali (International scientific journal "Science and Innovation") tahririyatida tahrirdan o'tkazilib, o'zbek, ingliz va rus tillaridagi matnlari o'zaro muvofiqlashtirildi (04.05.2023).

---

*Bosishga ruxsat etildi 05.05.2023. Qog'oz o'lchami 60x84 – 1/16*

*Hajmi 2, 75 b.t. 55 nusxa. Buyurtma № \_\_\_\_.*

*TIQXMMI bosmaxonasida chop etildi.*

*Toshkent 100000, Qori-Niyoziy ko'chasi 39 uy.*

