

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета на диссертацию Тумакова Дмитрия Андреевича на тему: «Расчёты полных и дифференциальных вероятностей ионизации атомов и ионов короткими лазерными импульсами», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика

Диссертация Д.А. Тумакова посвящена расчётом вероятностей для процессов ионизации атомов и ионов короткими интенсивными лазерными импульсами. Актуальность темы определяется необходимостью понимания таких процессов в области как прикладных, так и фундаментальных исследований. Расчёты дифференциальных параметров процессов ионизации позволяют получать информацию как о внутренней структуре мишени (атома или иона), так и о ходе самого процесса. Достигнутый в последние десятилетия прогресс в экспериментальной технике привёл к появлению новой области исследований – аттосекундной физики, целью которой является изучение электронной динамики и управление этой динамикой на аттосекундном (10^{-18} секунд) масштабе в атомах, молекулах и твёрдых телах. Главным инструментом для таких исследований являются короткие импульсы когерентного излучения. В релятивистской области расчёты вероятностей переходов в процессах ионизации могут быть использованы для проверки квантовой электродинамики. Особенно интересным в этом отношении является ионизация многозарядных ионов тяжёлых элементов, которые сами обладают огромным электрическим полем ядра. Эксперименты с такими системами станут возможными уже в ближайшие десятилетия. Всё это несомненно говорит об актуальности представленной к защите работы.

Представленная к защите диссертация состоит из введения, пяти глав и приложения, содержащего детальное описание базисного набора, использованного в численных расчётах. Работа сопровождается обширным списком цитируемой литературы. По материалам работы опубликовано 3 статьи, содержание которых обсуждалось на ряде международных конференций.

Первая глава имеет технический характер. Она посвящена изложению обобщённого псевдоспектрального метода, который широко используется при численном моделировании процессов ионизации. Ввиду численной сложности рассматриваемой задачи, оказывается удобным использовать различные подходы к дискретизации уравнений электронной динамики в зависимости от параметров как мишени, так и внешнего поля. Помимо детального изложения каждого из подходов приводятся оценки на время расчёта для используемых алгоритмов.

Во второй главе приводятся результаты релятивистских расчётов полных вероятностей ионизации для водородоподобного иона, а также для двух многоэлектронных систем, межэлектронное взаимодействие в которых учитывается приближенно в рамках теории функционала плотности. Результаты демонстрируют важность учёта как межэлектронного отклика системы на внешнее поле, так и релятивистских эффектов с ростом заряда ядра.

Более детальная информация о процессах ионизации может быть получена при помощи исследования дифференциальных вероятностей – энергетических спектров и угловых распределений фотоэлектронов. Методам непосредственного расчёта таких вероятностей посвящена третья глава диссертации.

В четвёртой главе исследуется ионизация атома лития в резонансном режиме, в котором частота лазерного поля равна частоте перехода между основным и первым возбуждённым состоянием. Показано, что возникающие в такой ситуации осцилляции заселённости состояний отчетливо проявляются в получающихся спектрах фотоэлектронов в виде интерференционной структуры с ярко выраженнымами минимумами. Эта структура подробно исследована в работе как качественно, так и количественно.

В заключительной главе диссертации предложен релятивистский метод расчёта дифференциальных вероятностей в процессах ионизации. В связи с тем, что сама постановка задачи – атомная система и внешнее поле – предполагает два пространственных масштаба, которые в общем случае могут отличаться друг от друга на порядки величины, непосредственный расчёт дифференциальных вероятностей в координатном представлении может быть принципиально невозможен. В работе предлагается релятивистская модификация широко известного метода разделения пространства, который позволяет получать в расчётах спектры фотоэлектронов без знания полной волновой функции электрона. Показано, что в области параметров поля, в которой применим и стандартный подход, предложенный метод успешно воспроизводит дифференциальные вероятности, вычисленные напрямую. Несмотря на то, что изложенный алгоритм справедлив лишь в дипольном приближении, применимость которого в релятивистской области очень ограничена, он может быть использован в качестве базиса для исследования недипольных эффектов совместно с полным расчётом за рамками дипольного приближения.

Текст диссертации написан достаточно хорошо, однако у меня есть ряд вопросов и комментариев по содержанию и оформлению работы:

1. По-видимому, текущее состояние области исследований изложено во введении слишком кратко. В частности, очень кратко упомянуты аналитические и полуаналитические методы описания процессов ионизации, которые широко используются для получения как качественных, так и количественных результатов с хорошей точностью.
2. В первой главе изложены различные подходы дискретизации уравнений Шрёдингера и Дирака в рамках обобщенного псевдоспектрального метода. По-видимому, для удобства читателя стоило бы добавить таблицу с оценками на вычислительную сложность методов, а также другими аргументами в пользу того или иного подхода.
3. В тексте диссертации используются многочисленные аббревиатуры (ATI, DFT, RMM...), которые, однако, неоднократно расшифровываются в разных местах. Также достаточно много повторов встречается при введении параметров, характеризующих поле лазерного излучения. Текст можно было бы сократить с помощью отказа от таких дублирований.

4. При описании процесса резонансной ионизации атома лития в работе упоминается, что расчёты проводились не только с модельной «трапециевидной», но и с более приближённой к реальности огибающей в виде квадрата синуса. В качестве иллюстрации результатов приводится ряд спектров на рис. 13. Возможно, на нём стоило привести меньше кривых, либо сопроводить его более подробным комментарием.

5. Пятая глава в работе посвящена предлагаемому в работе релятивистскому методу расчёта спектров фотоэлектронов. Однако в тексте отсутствуют технические детали вычислений, которые, на мой взгляд, необходимы для демонстрации эффективности численной процедуры.

6. Проблема применимости дипольного приближения в задачах ионизации кажется достойной отдельного детального обсуждения, в то время как в работе она упоминается скорее только в связи с конкретными расчётами.

Приведенные замечания, конечно, не касаются основных результатов диссертации и не влияют на общую высокую оценку проделанной автором работы.

Диссертация Тумакова Дмитрия Андреевича на тему: «Расчёты полных и дифференциальных вероятностей ионизации атомов и ионов короткими лазерными импульсами» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 01.09.2016 № 6821/1 «О порядке присуждения учёных степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Тумаков Дмитрий Андреевич заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. Пункт 11 указанного Порядка диссертантом не нарушен.

Доктор физико-математических наук,

ведущий научный сотрудник

Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константина» Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

Подпись руки
ЗАВЕРЯЮ

НАЧАЛЬНИК ОТДЕЛА КАДРОВ ЗИНОВЬЕВА А. Н.

23. 12. 2020



Нефёдов Андрей Владимирович

23 декабря 2020 г.