Physikalisch-Technische Bundesanstalt
Braunschweig und Berlin
Nationales Metrologieinstitut

PTB • Postfach 33 45 • 38023 Braunschweig

Ihr Zeichen:
Ihre Nachricht vom:
Mein Zeichen:
Meine Nachricht vom:

Bearbeitet von: Prof. Dr. Andrey Surzhykov
Telefondurchwahl: +49 0531-592-8100
Telefaxdurchwahl:
E-Mail: andrey.surzhykov@ptb.de

Datum: January 14th, 2021

ОТЗЫВ

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

Диссертация Дмитрия Тумакова посвящена теоретическому исследованию ионизации атомов и ионов короткими лазерными импульсами. В настоящее время эта тема представляет огромный интерес как в экспериментальной так и теоретической атомной физике. Исследование динамики электрона в присутствии (ультра-) коротких электромагнитных импульсов позволяет лучше понять такие фундаментальные вопросы как временная зависимость базовых физических процессов и динамические свойства электрон-электронного взаимодействия. Более того, данные полученные в теоретических и экспериментальных работах по сверх-быстрой электронной динамике, играют важную роль в физике твёрдого тела, физике плазмы и химии, а также при разработке и диагностировании новых лазерных установок. С точки зрения теоретической атомной физики, описание ионизации атома в поле короткого электромагнитного импульса – очень сложная задача. Для её аккуратного решения требуется одновременный учёт временной зависимости процесса, а также много-частичных и даже релятивистских эффектов. По этой причине, в прошлом было разработано большое количество простых (и часто достаточно грубых) моделей, которые позволяют упростить вычисления сечений ионизации а также характеристик испущенного фото-электрона. В связи с развитием вычислительной техники однако появляется возможность «точного» теоретического анализа атомной ионизации короткими импульсами, основанного на *численном* решении трёхмерных уравнений Шрёдингера и Дирака. Диссертация Дмитрия Тумакова как раз посвящена исследованию возможностей такого *численного анализа* ионизации одно- и много-электронных систем. Представленные кандидатом теоретические методы и результаты находятся безусловно на переднем крае современных исследований сверх-быстрой электронной динамики в лазерных полях.

600 00 r

Диссертация представляет собой детальный и хорошо написанный обзор методов и результатов полученных кандидатом. После достаточно информативного Введения, Дмитрий Тумаков подробно излагает в **главе 1** численные методы решения трёхмерного уравнения Шрёдингера и Дирака для электрона в присутствии лазерного поля. Само поле рассматривается как классическое и взаимодействие между ним и электроном ограничивается дипольным приближением. Для такого—вполне разумного—приближения, волновая функция электрона раскладывается по конечному набору *дискретных* квази-состояний. В последнее время, множество методов «дискретизации электронного континуума» разработано и применено в задачах атомной физики. Дмитрий Тумаков использует в своих работах один из них – так называемый обобщенный псевдоспектральный метод (GPS approach). Подробное изложение этого метода в применении к одно-электронным системам заканчивается (уже в следующей главе) обсуждением результатов полученных на основе GPS метода для ионизации водородоподобного иона олова (**Рис. 2**). Здесь продемонстрировано очень хорошее согласие между результатами расчётов Дмитрия Тумакова и более ранних расчётов группы профессора Шабаева и берлинской группы профессора Саенса.

Переход от одно- к много-электронным системам подробно описан в **главе 2**. Здесь, много-электронная волновая функция аппроксимируется одним детерминантом Слейтера, построенным на одноэлектронных орбиталях, которые получены в рамках теории функционала плотности (DFT). При этом теория учитывает тот факт что электронная плотность, а значит и орбитали, могут меняться со временем за счёт взаимодействия с электромагнитным полем и много-частичной динамики. Этот—очень разумный—подход был использован для расчётов полной вероятности ионизации атома аргона для разных пиковых интенсивностей лазерного импульса (**Рис. 3**). Здесь опять продемонстрировано очень хорошее согласие с предыдущими теоретическими результатами.

Помимо полной (интегрированной) вероятности ионизации, энергетический спектр и угловое распределение испущенных электронов также представляют большой интерес как для эксперимента так и для теории. Теоретическое описание этих дифференциальных характеристик доступно в рамках стандартной теории рассеяния. Основные формулы такого «прямого» подхода кратко приведены в **главе 3** для нерелятивистского и релятивистского приближений. В **главе 4** прямой подход применён для теоретического исследования ионизации атома лития для так называемого резонансного режима, когда энергия налетающих фотонов равна энергии 2s – 2p перехода. В этом случае, процесс мульти-фотонной ионизации сопровождается осцилляциями Раби между основным 2s и возбуждённым 2p состояниями. Как показано в расчётах кандидата, эти осцилляции приводят к очень интересным интерференционным структурам в энергетических спектрах фотоэлектронов. Детальное исследование этих структур проведено кандидатом в рамках нестационарного уравнения Шрёдингера и приближении одного активного электрона (SAE).

Прямолинейное использование методов теории рассеяния для описания ионизации атомов короткими лазерными импульсами часто является очень сложной вычислительной задачей из за быстрого «расплывания» волнового пакета электрона. В **главе 5** кандидат показывает что для расчёта физических наблюдаемых точная информация об электронной волновой функции во *всём* объёме пространства (во всём «ящике») не требуется. Расчёты вероятностей ионизации и распределений фотоэлектронов могут быть существенно ускорены если только в ограниченной области пространства временная эволюция волновой

функции описывается численно, учитывая взаимодействие как с лазерным излучением так и с полем иона, тогда как в остальном пространстве задача решается без учёта кулоновского взаимодействия по возможности аналитически. В то время как этот *метод разделения пространства* хорошо разработан для нерелятивистского приближения, его применение для релятивистских расчётов затруднено необходимостью использования волновых функций Волкова, чей аналитический вид для релятивистского дипольного приближения неизвестен. В своей работе Дмитрий Тумаков предложил обойти эту трудность и использовать численные волковские волновые функции, полученные при решении дифференциального уравнения второго порядка. Для того чтобы продемонстрировать эффективность этого метода, детальные расчёты для вероятности ионизации а также энергетически-угловых распределений испущенного электрона были представлены для водородоподобного иона ксенона (**Рис. 16 и 17**) и атома водорода (**Рис. 18 и 19**).

Как я уже отметил выше, диссертация Дмитрия Тумакова хорошо написана и, насколько я могу судить, не содержит принципиальных ошибок. После её прочтения у меня возникло только несколько предложений и замечаний, которые я привожу ниже:

- При обсуждении методов генерации много-электронной волновой функции Дмитрий упоминает приближение одного активного электрона и *одно-детерминантное* приближение, в котором орбитали получены в рамках теории функционала плотности как два принципиально разных метода. С моей точки зрения это один и тот же метод. Вопрос только в каком приближении получены одно-электронные орбитали. Или я не прав?

- Мне показалось что обсуждение «много-электронной» теории в главе 2 стоит несколько особняком от остальных частей работы. Было бы интересно понять, можно ли изучать влияние много-электронных эффектов на энергетические и угловые распределения фотоэлектронов в релятивистском приближении. Допустим, при обсуждении релятивистских расчётов в главе 3.2 было бы интересно более детально обсудить в каком приближении получаются волновые функции (97). Можно ли их получить в приближении DFT потенциала?

- Применение дипольного приближения в данной диссертации полностью оправданно. Но тем не менее, было бы очень интересно если бы Дмитрий обсудил (в качестве планов на будущее) как предложенные методы могут быть обобщены для учёта недипольных эффектов. Какие трудности связаны с таким обобщением?

В заключении, диссертационная работа Дмитрия Тумакова выполнена на высоком теоретическом уровне. Разработанные методы и полученные результаты безусловно вносят важный вклад в исследование электронной динамики в присутствии коротких лазерных импульсов. Результаты работ Дмитрия опубликованы в высокорейтинговых международных журналах и уже получили высокие оценки от международных коллег.

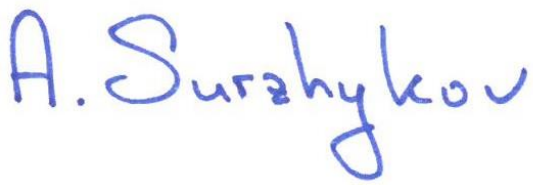
Диссертация Тумакова Дмитрия Андреевича на тему: «Расчеты полных и дифференциальных вероятностей ионизации атомов и ионов короткими лазерными импульсами» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 01.09.2016 № 6821/1 «О порядке присуждения ученых степеней в

Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Тумаков Дмитрий Андреевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика. Пункт 11 указанного Порядка диссертантом не нарушен.

Член диссертационного совета

Андрей Суржиков (Andrey Surzhykov)
Доктор наук (Dr. habil.)

Профессор Брауншвейгского технического университета,
директор института «Фундаментальная физика для метрологии»
в Физико-техническом федеральном ведомстве Германии (PTB)



Bundesallee 100,
D-38116 Braunschweig, Germany
Tel: +49 531 592-8100

14 января 2021