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 Д.А. Тумакова посвящена теоретическому исследованию процессов многофотонной ионизации атомов и ионов. Огромный экспериментальный и теоретический интерес к таким процессам мотивирован стремительным развитием возможностей современных лазерных установок. С ростом интенсивности и частоты генерируемых в них лазерных импульсах открываются возможности для наблюдения и исследования динамики электронов в атомах и молекулярных системах на аттосекундном масштабе. Такие исследования являются *важной и фундаментальной задачей* современной физики, поскольку имеют большое значение как для фундаментальной науки (например, для проверки квантовоэлектродинамической теории), так и для приложений.

Актуальность представленной работы состоит в том, что ввиду невозможности полностью аналитического описания процессов ионизации существуют и активно развиваются методы, использующие численные алгоритмы. Повышение точности этих методов является актуальной задачей квантовой оптики и является необходимым в связи с быстрым развитием экспериментальных методов исследования.

Научная и практическая ценность работы состоит в том, что в данной диссертации были предложены и развиты методы, позволяющие при небольшом числе приближений описывать релятивистскую динамику электронов в процессе ионизации. Эти методы основаны на численном решении уравнений Шредингера и Дирака с помощью программных кодов, реализованных автором. Кроме того, получен ряд новых результатов, представляющих большой интерес для научного сообщества, специализирующегося в данной области.

Диссертация состоит из пяти глав. В первой главе подробно изложен метод численного решения уравнений Шредингера и Дирака в базисе полиномов Лагранжа. Основным его преимуществом является диагональный вид операторов умножения после дискретизации, что позволяет уменьшить время расчетов. Вторая глава посвящена расчетам полных вероятностей ионизации для релятивистских мишеней. В частности, рассматривается аргоноподобный ион ксенона с частичным учетом межэлектронного взаимодействия. Демонстрируется, что использование теории функционала плотности позволяет использовать методы, разработанные для одноэлектронных мишеней, с лишь незначительными изменениями.

Следующие три главы посвящены расчетам дифференциальных вероятностей ионизации при помощи двух различных подходов. Первый подход основан на вычислении вероятностей с использованием полной волновой функции электрона после взаимодействия с лазерным импульсом. Такой подход был использован в четвертой главе диссертации. В ней исследуется интерференционная картина, возникающая в первом пике спектра фотоэлектронов при резонансной ионизации атома лития. В рамках второго подхода, а именно метода разделения пространства, зависящая от времени волновая функция задается в координатном, и в импульсном пространствах. Область применимости второго подхода существенно больше. В главе 5 предложена реализация такого метода на примере релятивистских расчетов дифференциальных вероятностей в процессах ионизации водородоподобных ионов.

Особо я хотел бы отметить использование автором работы современных алгоритмов, повышающих эффективность методов решения временных уравнений Шредингера и Дирака,

в частности применение алгоритмов PARDISO для решения систем линейных с разреженными матрицами, что повышает эффективность, например, метода Кранка-Николсон на порядок.

Замечаний по существу работы, которые могли бы подвергнуть сомнению достоверность полученных результатов у меня не имеется. Отмечу лишь некоторые неточности и возникшие у меня вопросы.

1) На с.13. диссертант пишет, что преимуществом базиса полиномов Лагранжа "является то, что матрица любого оператора умножения в нем является диагональной". Это действительно так только, если интегрирование выполняется по приближенным формулам с использованием только точек сетки в качестве узлов интегрирования.

2) с. 24. Зачем нужна единичная матрица 2-ого порядка в уравнении (48), что приводит к тому, что радиальный оператор H_0 становится 4-ех компонентным, хотя он действует на двухкомпонентные радиальные функции. Тоже относится и к уравнению (61).

3) В релятивистских расчетах аргоноподобного ксенона использовалось нерелятивистское выражение для обменно-корреляционного члена. Можно ли как-то оценить погрешность, вносимую этим приближением?

4) В разделе 5.5 обсуждается вопрос о применимости дипольного приближения в расчетах вероятностей многофотонной ионизации тома водорода и водородоподобного иона ксенона. Из чтения текста диссертации мне осталось непонятным, что значит условие малости смещения классического электрона под действием силы Лоренца и почему это условие выполняется, если параметр Лоренца много меньше единицы. Нельзя ли условие «малости смещения» сформулировать в терминах квантовой механики. Кроме того, в работе не обсуждается, выполняется ли это условие в расчетах ионизации водородоподобного олова.

5) Отмечу ряд мелких замечаний, которые я обнаружил в формулах.

a) с.33 "Начальное значение проекции полного момента электрона m считается равным минус единице". Почему m=-1, а не -1/2?

b) На с.46, в формуле (96) пропущено суммирование по m.

c) В формуле (103) в релятивистском случае нужно вести суммирование по состояниям с энергиями e > mc^2, а не e > 0.

d) Выражение для оператора эволюции (126) является приближенным, поскольку операторы Гамильтона не коммутируют в разные моменты времени.

Как уже отмечалось сделанные выше замечания не снижают научную ценность диссертации и не влияют на общую высокую оценку, проделанной автором работы.

Результаты, полученные в диссертация Д.А. Тумакова, были опубликованы в трех статьях в высокорейтинговых международных журналах, что наряду с использованием современных теоретических методов, подчеркивает *достоверность* полученных результатов. Во всех статьях, указанных в диссертации, диссертант выступает в качестве первого автора, что о свидетельствует о большом вкладе диссертанта в разработку исследуемых проблем. Помимо этого, результаты также обсуждались на ряде международных конференций. Все это говорит о высоком уровне и большой значимости проделанной работы.

Останавливаясь на работе в целом, следует отметить, что диссертация Д. А. Тумакова выполнена на высоком научном уровне, является законченной научно-исследовательской работой и представляет значительный интерес с теоретической точки зрения, а также дальнейших перспектив практического применения развитых методов к изучению процессов ионизации в лазерном поле.

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

Доктор физико-математических наук, ст.научн.сотр.,

профессор кафедры квантовой механики

физического факультета Санкт-Петербургского

государственного университета

Тупицын Илья Игоревич

20 января 2021 г.