

## ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Карпешина Федора Федоровича

на диссертацию Крапивина Дмитрия Андреевича на тему «Электронные переходы в двухатомных квазимолекулах при взаимодействии с импульсами сильного электромагнитного поля», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Стратегическая тенденция в современных лазерных исследованиях – применение все более коротких, вплоть до аттосекундных, импульсов огромной мощности, в том числе в области коротких длин волн. Хорошую перспективу обещают лазеры на свободных электронах. Предметом исследования являются атомные ядра, атомы и молекулы. Атомы представляю собой простейшие системы, позволяющие изучать физику явлений. Развитие теории необходимо для понимания процессов в молекулах и их особенностей в процессах с участием атомных ядер. Более того, применение сверхкоротких импульсов привлекательно для исследования динамики процессов неупругих столкновений атомов, которые можно рассматривать как эволюцию их квазимолекулярных состояний. В частности, актуальной задачей является исследование комбинированных ядерно-электронных процессов и триггинга энергии ядерных изомеров в столкновениях атомов. В свою очередь, здесь можно перекинуть мостик к решению задачи построения ядерно-оптического стандарта частоты и их применения для изучения проблемы темной материи и энергии во Вселенной.

В соответствии с обрисованной выше схемой, первая глава диссертации посвящена изучению процессов взаимодействия простейших молекул  $H_2^+$  с лазерным излучением. Построена система квазимолекулярных волновых функций дискретного спектра уравнения Шредингера в сферической системе координат. Путем численного решения конечно-разностным методом нестационарного уравнения Шредингера в поле линейно-поляризованного излучения лазерного источника рассчитывалась вероятность ионизации молекулы в зависимости от межъядерного расстояния, длины волны излучения лазера в диапазоне от 4 до 34 нм и его интенсивности, а также взаимного направления межъядерной оси молекулы и вектора поляризации излучения. Вероятности многофотонной ионизации при выбранных интенсивностях внешнего поля полагаются малыми. Для решения нестационарного уравнения Шредингера использовался численный алгоритм Кранка-Николсона, который оказался более эффективным по сравнению с другим известным алгоритмом сплит-оператора. В качестве исходного состояния была выбрана орбиталь  $1\sigma_u$ . Из общих физических соображений можно ожидать, что вероятность ионизации линейно-поляризованным лазерным источником максимальна, если направление поляризации совпадает с осью молекулы. Однако расчет показал, что это не всегда так. Найдены случаи аномальной зависимости вероятности ионизации, когда она максимальна при перпендикулярной ориентации молекулы относительно вектора поляризации, а при параллельной ориентации вероятность ионизации достигает минимума.

Во второй главе диссертации разработанный метод обобщается на случай одноэлектронных гомоядерных квазимолекул с атомным номером составляющих атомов  $Z$

> 1. Рассмотрение собственных значений электрона в случае средних и тяжёлых атомов, а также его взаимодействия с внешним полем требует решения стационарного и нестационарного уравнения Дирака. Соответственно был модифицирован алгоритм Кранка-Николсона для решения уравнения Дирака в сферической системе координат. Достоинством метода стало отсутствие шпурioзных уровней среди низколежащих связанных состояний. В случае уравнения Шредингера собственные значения системы с  $Z > 1$  можно было получить путем масштабирования. Поэтому сравнение результатов точного решения с масштабированным решением из главы I демонстрирует возрастающую при увеличении  $Z$  роль релятивистских эффектов, а также выхода за рамки дипольного приближения. Учет релятивистских эффектов приводит к росту потенциала ионизации, что уменьшает вероятность ионизации лазерным импульсом. С другой стороны, были исследованы резонансные эффекты во взаимодействии пары электронных состояний  $1\sigma_g - 1\sigma_u$ , которые увеличивают вероятность ионизации.

В третьей главе рассматриваются столкновения протонов с атомами водорода в поле излучения лазера. Исследуется вероятность ионизации, а также перехвата электрона протоном в зависимости от частоты излучения и его фазы. Результаты свидетельствуют о том, что в случае малой частоты поля  $\omega = 0.01$  а.е. вероятности ионизации и перехвата электрона существенно зависят от фазы излучения. Эффект особенно значителен при малых прицельных параметрах. Перемена направления поля на противоположное, то есть фазы с 0 до 180 или с 90 до 270 градусов, приводит к существенной вариации этих вероятностей. Все полученные закономерности находят детальное объяснение в диссертации в рамках суперпозиции кулоновского поля ядер и лазерного поля. Показан важный вклад вышележащих по сравнению с  $1\sigma_u$  и  $1\sigma_g$  орбиталями промежуточных электронных состояний. При высокой частоте внешнего поля  $\omega = 2$  а.е. эффект его влияния на вероятности ионизации и перехвата пропадает ввиду того, что колебания электронной плотности не успевают за колебаниями внешнего поля.

Диссертация не свободна от недостатков. В терминологическом плане, не могу согласиться с предложенным термином «интерференция» как причиной аномальной угловой зависимости вероятности ионизации. Матричные элементы перехода определяются не интерференцией, а правилами отбора, в данном случае – электрического дипольного перехода. Они учитывают естественную симметрию задачи. При этом вклады обеих ям всегда одинаковы; они складываются конструктивно, если переход разрешен, и деструктивно, если он запрещен. В данном случае не видно причин говорить о подавлении разрешенных переходов. Поэтому ошибочным представляется, например, такое утверждение: «При вылете электрона в направлении внешнего поля, то есть перпендикулярно оси молекулы, интерференция вкладов в амплитуду ионизации от окрестностей двух ядер всегда деструктивная, что приводит к подавлению ионизации». Поскольку электроны приводятся в движение линейно поляризованным лазерным полем, у них больше шансов вылететь вдоль направления внешнего поля. Когда это направление поля совпадает с ориентацией молекулы, матричный элемент от взаимодействия  $z$  в общем случае оказывается больше, чем  $x$  – просто в силу протяженности системы вдоль оси  $z$ . Такое объяснение подтверждается рисунком 1.2 справа, а также сравнением рисунков 1.3 а, с. Аномальное же угловое распределение объясняется не интерференцией, а случайным подавлением матричного элемента взаимодействия  $z$  (одинаковым в каждой яме)



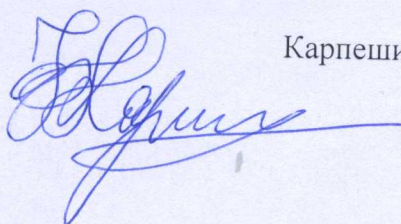
вследствие осцилляции волновой функции фотоэлектрона. Для дальнейшего прояснения этого вопроса были бы очень кстати графики волновой функции электронов в сплошном спектре.

Перечисленные замечания не снижают качества диссертации. Они не умаляют важность и значимость проделанной соискателем весьма объемной работы. Диссертация является законченной научно-квалификационной работой. Диссертация Крапивина Дмитрия Андреевича на тему: «Электронные переходы в двухатомных квазимолекулах при взаимодействии с импульсами сильного электромагнитного поля» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Крапивин Дмитрий Андреевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не обнаружены.

Член диссертационного совета

Доктор физико-математических наук,  
Главный научный сотрудник отдела теоретической метрологии  
Всероссийского научно-исследовательского  
Института метрологии имени Д.И. Менделеева

Карпешин Ф. Ф.



Дата 17.05.2024 г.