

## ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Козлова Михаила Геннадьевича 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.

Диссертационная работа Д. А. Крапивина посвящена теоретическому исследованию процессов ионизации и перезарядки в столкновении одноэлектронного атома или иона с ядром в присутствии импульса лазерного поля. Расчеты проводятся как в нерелятивистском приближении на основе решения нестационарного уравнения Шредингера, так и используя уравнение Дирака. Выполнено исследование влияния амплитуды, частоты, поляризации и фазы внешнего поля на вероятности ионизации и перезарядки. Обнаружен и объяснен интересный эффект необычной зависимости вероятности ионизации от ориентации оси квазимолекулы по отношению к направлению поляризации лазерного поля. Перечисленные результаты диссертационной работы **являются новыми** и свидетельствуют о ее **актуальности**.

Диссертация состоит из введения, трех глав и заключения. Она включает 93 страницы, 17 рисунков и 3 таблицы. Список литературы содержит 99 наименований и достаточно полно отражает актуальную научную литературу по теме диссертации.

**Во введении** приводится обзор литературы, обосновывается важность и актуальность темы диссертации и формулируется основная цель работы, которая заключается в разработке численно стабильных алгоритмов решения нестационарных уравнений Шредингера и Дирака для двухатомных молекул в лазерном поле. Далее перечисляются задачи, решенные в диссертационной работе, и формулируются положения, выносимые на защиту. В конце введения описана структура диссертации. В частности указано, что каждая из трех глав диссертации описывает отдельную задачу.

**Первая глава** диссертации посвящена рассмотрению процесса однофотонной ионизации молекулы  $\text{H}_2^+$  в первом возбужденном состоянии  $1\sigma_u$  линейно поляризованным лазерным импульсом очень большой частоты. Показано, что эффект интерференции от двух центров приводит к нетривиальной зависимости сечения ионизации и углового распределения фотоэлектронов от длины волны поля. В интервале длин волн от 6 до 23 нм наблюдается аномальная зависимость вероятности ионизации от ориентации оси молекулы по отношению к вектору поляризации внешнего поля, когда минимум ионизации соответствует продольной ориентации, а максимум – перпендикулярной. Такое поведение сечения выглядит странным, но автор дает ему достаточно убедительное качественное объяснение. Дело в том, что в результате конструктивной двухцентрковой интерференции, фотоэлектроны могут преимущественно вылетать под углом к направлению лазерного поля. Именно это обстоятельство и приводит к необычной угловой зависимости сечения фотоионизации.

**Во второй главе** работы исследуется влияние релятивистских эффектов на процесс (многофотонной) ионизации одноэлектронных гомоядерных квазимолекул с различными зарядами ядер  $Z$ . Для этого автором разработаны устойчивые численные алгоритмы решения нестационарного уравнения Дирака во внешнем поле. Проведено сравнение результатов расчетов с использованием и без использования дипольного приближения. Как и следовало ожидать, и релятивистские, и недипольные эффекты становятся существенными с ростом заряда  $Z$ . Численные расчеты показали, что дипольное приближение перестает работать уже для  $Z=35$ .

**В третьей главе** исследуется влияние фазы электромагнитного поля на процесс перезарядки и ионизации в столкновении атома водорода с протоном. Для решения этой задачи автором предложен достаточно оригинальный численный метод. Для низкочастотного внешнего поля влияние его фазы оказалось весьма существенным. В то же время, фаза высокочастотного поля практически не влияет на сечения перезарядки и ионизации. Эти результаты вполне согласуются с ожиданиями на основании простых качественных рассуждений.

Диссертация в целом хорошо написана. В тексте даются ссылки на все основные работы по теме диссертации. Изложение достаточно аргументировано и логично, хотя, на мой взгляд, излишне формально. Хотелось бы, чтобы больше внимания было уделено физической стороне обсуждаемых процессов. Не всегда дается объяснение выбора конкретных условий при постановке задач. В частности, в первой главе не объяснено, почему в качестве начального состояния выбрано несимметричное возбужденное состояние  $1\sigma_u$ . В диссертации никак не обсуждается, насколько такая постановка задачи может быть реализована экспериментально. В других главах тоже не обсуждается выбор параметров (амплитуд и частот внешнего поля, скоростей движения ионов и т.д.) и не затрагиваются вопросы возможности экспериментальной проверки полученных результатов.

По тексту диссертации можно сделать еще несколько замечаний.

1. В формулах (1.8) – (1.10) присутствует величина  $f$ , которая в тексте нигде не определена.
2. В уравнении (1.29) не сказано, какие функции  $\psi_s$  используются при вычислении матричных элементов гамильтониана. Из следующего уравнения (1.30) следует, что параметр  $T_l=l$ . Если это так, то непонятно, зачем вводить новое обозначение и усложнять формулы.
3. На стр. 28 написано: «Для начального состояния  $1\sigma_u$  это отношение меньше единицы для длин волн между порогом однофотонной ионизации при  $\lambda = 23$  нм и  $\lambda = 68$  нм.» Если порог однофотонной ионизации соответствует  $\lambda = 23$  нм, то в интервале от 23 до 68 нм возможна только многофотонная ионизация. Это случайное совпадение, что отношение становится меньше единицы именно на пороге?
4. На стр. 50 говорится: «Как правило, любое различие между предсказаниями нестационарного уравнения Дирака и соответствующими результатами нестационарного уравнения Шредингера для одной и той же системы можно объяснить релятивистскими эффектами.» Возникает вопрос, а какое еще объяснение может быть?
5. На стр. 69 рисунок 3.3 упоминается раньше, чем 3.2.

Все сделанные выше замечания и пожелания носят частный характер и не влияют на общую оценку диссертации. Работа выполнена на высоком профессиональном уровне, результаты полностью опубликованы в трех статьях в ведущих международных рецензируемых журналах, таких, как Journal of Physics B и The European Physical Journal D и неоднократно докладывались на научных конференциях.

**Заключение.** Диссертация Дмитрия Андреевича Крапивина 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 Дмитрий Андреевич Крапивин 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 ф.-м. н.,  
ведущий научный сотрудник,

Петербургский институт ядерной  
физики НИЦ «Курчатовский  
институт»



Козлов Михаил Геннадьевич

21 мая 2024 г.