

## ОТЗЫВ

Члена диссертационного совета Петрова Александра Николаевича 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.

В диссертации разработан метод численного решения стационарного и нестационарного уравнения Шредингера и уравнения Дирака в вытянутой сфероидальной системе координат для исследования взаимодействия двухатомных одноэлектронных квазимолекул с импульсами сильного когерентного излучения. Разработанный алгоритм позволяет рассчитывать энергии и волновые функции дискретного и сплошного спектра, вероятности и сечения ионизации и перезарядки. Метод применен для расчета соответствующих свойств одноэлектронных гомоядерных квазимолекул с зарядами ядер  $Z=1$  ( $H_2^+$ ), 18, 54, 80, 92.

Актуальность работы связана с достижениями последних лет в области создания мощных коротких лазерных импульсов. Наблюдаемые разнообразные процессы с двухатомными молекулами и квазимолекулами в лазерных полях нуждаются в теоретическом объяснении. Диссертация Крапивина Дмитрия Андреевича дает важный вклад в этом направлении. Отметим, что даже самые простые двухатомные квазимолекулы в сильных лазерных полях являются весьма сложными объектами для теоретического исследования из-за большего (по сравнению с атомами) числа степеней свободы и необходимости учета релятивистские эффекты.

В первой главе подробно изложен теоретический подход и используемые численные методы при решении нестационарного уравнения Шредингера. Обнаружена аномальная зависимость вероятности ионизации от угла между осью молекулы и вектором поляризации внешнего поля. Показано, что это явление связано конструктивной двухцентрковой интерференцией. Во второй главе изложен теоретический подход и численные методы, используемые при решении нестационарного уравнения Дирака. Рассмотрены релятивистские и эффекты, связанные с выходом за рамки дипольного приближения. В третьей главе рассчитываются сечения и вероятности перезарядки и ионизации при низкоэнергетическом столкновении протона с атомом водорода в присутствии лазерного излучения. Проведено большое количество расчетов, результаты которых представлены как функции различных параметров, которые включают частоту лазерного излучения, угол между поляризацией излучения и осью молекулы, прицельного расстояния и др. Соискателем проведена большая работа по систематизации данных. Закономерности, полученные в работе почти во всех случаях удалось объяснить из простых физических соображений, что, в частности,



еще раз подтверждает достоверность полученных результатов. Результаты опубликованы в 3 статьях в журналах, рекомендованных ВАК РФ и/или входящих в базы данных РИНЦ, Web of Science и Scopus, докладывались на Российских и международных конференциях.

По диссертационной работе можно сделать следующие замечания.

Во введении автор пишет, что основные цели работы заключаются в разработке и применении численно стабильных алгоритмов решения уравнения Шредингера и уравнения Дирака для исследования взаимодействия двухатомных молекул и квазимолекул с импульсами сильного когерентного излучения. Молекулы — это системы с двумя и более числом электронов. Однако в диссертации рассмотрены только одноэлектронные системы. Не обсуждается на сколько легко разработанные методы могут быть адаптированы и применены для систем с бóльшим числом электронов.

В формуле (3.24) на стр. 79 производится усреднение по фазе вероятности переноса заряда, при этом вероятность была вычислена только для четырех значений фазы. Не ясно какова точность усреднения в данном случае.

На стр. 9 говорится, что в работе используются атомные единицы. В этом случае в ряде формул (например (1.3)) должна явным образом присутствовать скорость света.

Сделанные несущественные замечания не снижают высокой оценки проведенного исследования. 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 физ.-мат. наук, доцент, профессор  
кафедры квантовой механики СПбГУ,  
в.н.с НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ

Петров А.Н.

15.05.2024



Петрова А.Н.