

ОТЗЫВ

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

Работа Дмитрия Александровича Крапивина посвящена исследованию поведения квазимолекулярных систем в сильных внешних полях. При этом особое внимание уделяется процессам, происходящим в полях сильных ультрафиолетовых импульсов, релятивистским моделям и недипольным эффектам.

К несомненным достоинствам работы следует отнести широкий набор исследованных моделей и процессов, важность исследованных процессов для изучения взаимодействия молекулярных систем с сильными внешними полями.

В работе присутствуют стилистические недоработки. В частности, на странице 6 введения автор поясняет эффект конструктивной интерференции следующим образом: «Эффект проявляется в виде локального минимума, в угловых распределениях фотоэлектронов, в направлении поляризации внешнего поля при параллельной ориентации оси молекулы». Остаётся неясным, о локальном минимуме какой величины идёт речь, как направление внешнего поля при параллельной ориентации оси молекулы может быть связано с интерференционными эффектами. На странице 16 первой главы используется выражение «размер пространственной области, за пределами которого функция полагается равной нулю». Вероятно, автор имеет в виду обращение в нуль функции за пределами области, размер которой превышает некоторую фиксированную величину. На странице 52 остаётся непрояснённым термин «вертикальный потенциал ионизации». Подобные недоработки присутствуют и далее по тексту диссертации.

Есть и более существенные недоработки текста диссертации, которые трудно отнести к стремлению автора сократить её объём. На странице 19 не указана связь между уравнениями (1.1)-(1.12) и (1.29). Не введены базисные функции ψ_s . Также, далее, говорится, что после дискретизации уравнение (1.1) превращается в систему линейных уравнений. Правильнее было бы сказать, что уравнение (1.1) превращается в систему линейных дифференциальных уравнений, а волновые функции связанных состояний и соответствующие энергии получают путём диагонализации дискретизованного уравнения (1.2).

Более существенно, что в представленном описании схемы дискретизации отсутствует описание использованных автором базисных функций, что не позволяет считать изложение материала раздела достаточным, для воспроизведения представленных результатов. Это замечание относится к описанию всех численных результатов, представленных в работе.

В разделе 1.2 диссертации производится сравнение метода расщепления операторов с методом Крэнка-Николсон. Однако, отсутствуют описания методов решения систем линейных алгебраических уравнений, использованных в реализации метода Крэнка-Николсон, отсутствуют описания методов вычисления матричных экспонент, не приведены оценки вычислительной сложности использованных алгоритмов. По этой причине, выводы о преимуществе метода Крэнка-Николсон над использованием формулы расщепления операторов выглядят поверхностными и малоинформативными.

Обсуждая «аномальные» угловые распределения фотоэлектронов, автор предлагает модельное описание, объясняющее «аномальные» распределения, и иллюстрирует эффект результатами вычислительных экспериментов. В то же время, обсуждение вычислительных экспериментов не вполне выявляет связь между предсказаниями модели и результатами прямых вычислений: есть ли систематическое согласие между модельными и вычислительными результатами? Если есть, является ли оно количественным или качественным? Приведено лишь сравнение модельных результатов с первым порядком теории возмущений, но не с прямыми вычислениями.

При решении уравнений эволюции (3.1) автор использует масштабное преобразование (3.9)-(3.10). Аналогичные преобразования приводят к существенному упрощению численного решения нестационарного уравнения Шредингера после исключения из уравнения членов типа (3.14) с помощью соответствующего фазового множителя благодаря исключению из решения кинематических осцилляций. Автор, однако, не рассматривает подобные преобразования, несмотря на потенциальную возможность существенно увеличить скорость вычислений либо их точность.

Автор основывает анализ зависимости вероятности ионизации и перезарядки на выборке только из четырёх равноотстоящих значений фазы. Известно, однако, что фазовые зависимости проявляются как результат интерференции мод, отвечающих различным количествам поглощённых и испущенных фотонов. По этой причине такая выборка фаз может зафиксировать только процессы, отвечающие только интерференции мод, отличающихся на один фотонный обмен. Если в исследуемый процесс могут вносить вклад более сложные, многофотонные обмены, то такая выборка фаз может не отразить присутствие фазовой зависимости исследуемых процессов. Для строго обоснования вывода, например, о фазовой независимости процесса, следовало бы проводить исследование с более детальной выборкой, либо показать, что многофотонные моды, отвечающие более сложным обменам системы с полем не интерферируют. К сожалению, автор не провёл анализа фазовых зависимостей с точки зрения интерференции различных многофотонных мод.

Приведённые замечания, однако, не снижают общей ценности и содержательности представленных исследований.

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

Д. ф.-м. н.,

профессор, кафедры вычислительной физики СПбГУ

В.А.Руднев

Дата

13.05.2024