

ОТЗЫВ

председателя диссертационного совета Тупицына Ильи Игоревича 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 Крапивина Дмитрия Андреевича посвящена разработке и применению численно стабильных алгоритмов решения уравнения Шредингера и уравнения Дирака для исследования взаимодействия двухатомных квазимолекул с импульсами сильного когерентного излучения. Следует отметить, что внешнее электромагнитное поле позволяет управлять процессом захвата электрона при столкновениях протона с атомом водорода. Практический интерес может представлять влияние фазы электромагнитного поля на вероятность процесс захвата. В работе рассмотрено также явление конструктивной двухцентральной интерференции, которая приводит к интересной зависимости вероятности ионизации от ориентации оси молекулы. Эти и другие вопросы, рассмотренные в диссертационной работе, свидетельствуют о ее **актуальности** и составляют **научную новизну** работы.

Диссертация Д.А. Крапивина содержит 93 страницы текста, включая 17 рисунков и 3 таблицы. Она состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы, который включает в себя 99 наименований.

Введение представляет собой подробный литературный обзор, который свидетельствует о важности и актуальности темы диссертационной работы. Кроме того, во введении сформулированы основные задачи работы, которые можно рассматривать как **основные тезисы, выносимые на защиту**.

В первой главе диссертации автором рассмотрен процесс двухцентральной интерференции однофотонной ионизации молекулы H_2^+ в возбужденном состоянии $1\sigma_u$ линейно поляризованным лазерным импульсом несущей длиной волны в далекой ультрафиолетовой области. Показано, что именно для антисвязывающего $1\sigma_u$ результатом такой интерференции, в интервале длин волн от 6 до 23 нм, является аномальная зависимость вероятности ионизации от ориентации оси молекулы, при которой максимум вероятности ионизации наблюдается при перпендикулярной ориентации молекулы относительно поляризации внешнего поля, а ионизация при параллельной ориентации, напротив, подавлена.

Во второй главе работы выполнен анализ релятивистских эффектов для различных одноэлектронных гомоядерных квазимолекул в сильном внешнем электромагнитном поле. Проанализирована связь эффекта зарядового резонанса гомоядерных квазимолекул с возникновением максимума вероятности ионизации при больших межъядерных расстояниях. Исследована применимость дипольного приближения в расчетах вероятности ионизации при больших значениях зарядов ядер. Сделан важный вывод о том, что при несущей частоте 3.5 а.е. и пиковой напряженности поля 40 а.е.

электромагнитного импульса уже начиная с $Z=35$ дипольное приближение приводит к неверным результатам.

В третьей главе диссертации рассмотрен процесс столкновения протона с атомом водорода. Исследован вопрос о влиянии фазы и интенсивности лазерного поля, линейно поляризованного в плоскости столкновения, на процесс ионизации и переноса заряда. Здесь я бы отметил в качестве одного из достоинств данной работы эффективный прием численного решения временного уравнения Шредингера, основанный на замене переменных, который позволяет использовать независимую от времени сетку в сферических координатах.

Достоверность полученных результатов не вызывает сомнений, поскольку в работе были использованы современные теоретические методы решения двухцентровых уравнений Шредингера и Дирака, а также проведено сравнение полученных в работе результатов с доступными в литературе данными.

Существенных замечаний, которые бы могли поставить под сомнение основные выводы данной работы, у меня не имеется. Однако, после чтения текста диссертации у меня возникло несколько вопросов и ряд мелких замечаний.

- 1) Во введении и в начале 1-ой главы нужно было четко сформулировать, почему была выбрана ионизация именно антисвязывающего состояния молекулярного иона H_2^+ .
- 2) В расчетах вероятностей различных процессов была выбрана калибровка скорости. На сколько устойчивы результаты работы в зависимости от выбора калибровки, например, калибровки длины?
- 3) В первой главе описана процедура использования сферических координат при решении нерелятивистского уравнения Шредингера для молекулярного иона H_2^+ . Эта процедура хорошо известна и подробно описана в литературе. Поэтому я считаю, что надо было сослаться, по крайней мере, на один из литературных источников (например, [Дж. Слэтер, Электронная структура молекул, М. 1965], Приложение 1).
- 4) Формула (1.21) выглядит странно. Здесь можно частично сократить числитель и знаменатель.
- 5) В комментариях к формуле (1.28) надо было отметить, что переменная s является целой и указать интервал ее изменения.
- 6) Исследовался ли вопрос о том, как результаты расчетов вероятности ионизации зависят от выбора масочной функции?
- 7) Насколько далека область лазерного импульса от границы ящика, где начинается область действия масочной функции?
- 8) В формулу (2.5) надо вставить скорость света для согласования с выражением (1.3).
- 9) Не указаны параметры масочной функции R_a и R_b в выражении (2.30). Похоже, что они должны были измениться по сравнению с (1.36), поскольку размер ящика изменился и стал равным $Z/50$?

10) В тексте диссертации встречаются неудачные словосочетания, например, «расстояние от электрона до ядра», "популяции несвязанных состояний", "заселенность полупространства", "заселенность налетающей частицы".

Отмеченные мелкие замечания и возникшие вопросы не влияют на общую положительную оценку диссертации.

Остановливаясь на диссертационной работе в целом, я бы отметил, что работа написана понятным языком, достаточно полно проиллюстрирована, материал работы изложен ясно и последовательно. Диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне и содержит целый ряд новых интересных результатов, достоверность и научная новизна которых не вызывает сомнений. Полученные Д.А. Крапивина научные результаты достаточно полно отражены в публикациях в высокорейтинговых международных журналах и неоднократно докладывались на научных конференциях и семинарах.

Заключение. 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.

Председатель диссертационного совета

Доктор физ.мат. наук, ст.н.сотр.,
профессор кафедры квантовой механики
физического факультета СПбГУ

/И.И. Тупицын/

Дата 08.05.2024