



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное
бюджетное образовательное
учреждение
высшего образования
«Воронежский государственный
университет»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

Университетская пл., 1, Воронеж, 394018.
Тел. (473) 220-75-21. Факс (473) 220-87-55.
E-mail: office@main.vsu.ru
<http://www.vsu.ru>
ОКПО 02068120, ОГРН 1023601560510
ИНН/КПП 3666029505/366601001

09.02.2024 № 0802-111
На № _____ от _____ .20 _____

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по науке,
инновациям и цифровизации
Воронежского
государственного университета
Д.Ф. Ма, доцент Д.В. Костин



Д.В. Костин
«09» февраля 2024 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертацию Крапивина Дмитрия Андреевича
«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

Актуальность темы диссертации. Диссертация Д.А. Крапивина посвящена теоретическому исследованию электронных переходов в двухатомных квазимолекулах при взаимодействии с импульсами электромагнитного поля. За последние годы развитие лазерных технологий сделало возможным экспериментальное исследование атомно-молекулярных процессов в аттосекундных масштабах времени, что открывает возможность наблюдения сверхбыстрой молекулярной динамики. А именно, появление лазеров на свободных электронах позволило получить когерентное коротковолновое излучение высокой интенсивности с длинами волн вплоть до рентеновского диапазона. Дополнительные (колебательные и вращательные) степени свободы (квази)молекул вместе с несферической симметрией существенно усложняют отклик данных систем на воздействие внешних полей по сравнению с атомами и дают дополнительный стимул для проведения соответствующих исследований в области как теории, так и эксперимента. Революционное изменение техники эксперимента привело к наблюдению зависимости разнообразных эффектов в (квази)молекулах от их пространственной ориентации, к возможности исследования вкладов разных электронных оболочек, дифракции электронных пучков на молекулах и к визуализации электронных орбиталей (электронная голография в сильном лазерном поле). Выбор квазимолекул в качестве объекта исследования обусловлен тем, что на практике в плазме, возникающей в фокальной области лазерного излучения, квазимолекулы могут возникать в столкновительных процессах и существовать достаточно долго по сравнению как с электронными временами, так и с длительностью лазерного импульса. Помимо фундаментального научного интереса выбранная область

исследования имеет большие практические перспективы, связанные с возможностью создания компактных источников интенсивного когерентного излучения и аттосекундных импульсов. Таким образом, актуальность темы диссертационной работы не вызывает сомнений. Целями работы являлись разработка и применение численно стабильных алгоритмов решения уравнений Шредингера и Дирака для исследования взаимодействия двухатомных молекул и квазимолекул с импульсами когерентного излучения высокой интенсивности. H_2^+ -подобные квазимолекулы и ион H_2^+ являются наиболее простыми объектами, удобными для теоретического исследования в данной области. Сочетание тематики исследования, формулировки его целей, используемых методов решения задач, области приложения результатов подтверждает, что данная диссертация **соответствует специальности 1.3.3. Теоретическая физика (в части пункта 6 паспорта специальности)**, по которой она представлена к защите.

Структура и содержание диссертации. 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.

Во Введении сформулированы цели диссертации, обоснована ее актуальность, аргументирована научная новизна исследований, указана практическая значимость полученных результатов и представлены выносимые на защиту научные положения.

В Главе 1 подробно изложен теоретический подход и используемые численные методы при решении уравнения Шредингера во внешнем поле в калибровке скорости для двухцентрковой системы H_2^+ . Построены волновые функции непрерывного спектра для электрона, движущегося в поле двух протонов. Исследована зависимость полной вероятности ионизации системы от ориентации молекулярной оси в линейно поляризованном лазерном поле из начального состояния $1\sigma_u$. Построены распределения вылетающих фотоэлектронов по энергиям и углам вылета для длин волн в мягком рентгеновском и XUV-диапазонах в однофотонном режиме.

Глава 2 посвящена изучению релятивистских эффектов в одноэлектронных H_2^+ -подобных релятивистских квазимолекулах, подверженных воздействию внешнего поля и эффектам, возникающим за счет выхода за рамки дипольного приближения.

В Главе 3 исследуется влияние фазы линейно поляризованного электромагнитного поля на процесс переноса заряда в столкновениях $\text{H}-\text{H}^+$. Столкновения рассматриваются в низкоэнергетическом режиме (скорость налетающего протона соответствует энергии 0.25 кэВ) в рамках дипольного приближения электромагнитного поля.

В Заключении приведены основные результаты, полученные в рамках диссертационной работы, и сделаны соответствующие выводы.

Научная новизна исследования. В рамках диссертации разработан полностью трехмерные алгоритмы решения нестационарных уравнений Шредингера и Дирака во внешнем поле для двухатомных квазимолекул за рамками дипольного приближения. Продемонстрирована возможность выбора параметров лазерного поля таким образом, чтобы максимум ионизации, как и максимум в угловых распределениях фотоэлектронов, наблюдался при перпендикулярной ориентации оси квазимолекулы и вектора поляризации лазерного поля. Представлен анализ влияния фазы линейно поляризованного электромагнитного поля в низкоэнергетических столкновениях протона с атомом водорода для длин волн в инфракрасной и далекой ультрафиолетовой области.

Практическая значимость работы. Разработанные алгоритмы описания взаимодействия молекул и квазимолекул с линейно поляризованным внешним полем могут найти свое применение в области приготовления молекул в определенном квантовом состоянии, в исследовании молекулярной электронной структуры и движения электронов для различных фиксированных ядерных конфигураций. Алгоритм, разработанный для релятивистского уравнения Дирака, позволяет проводить оценку релятивистских эффектов в квазимолекулах, а также создает необходимую теоретическую основу для управления резонансными процессами, которые могут существенно усилить ионизацию. Практическое приложение полученных результатов напрямую связано с возможностью создания компактных источников интенсивного когерентного излучения и аттосекундных импульсов.

Достоверность результатов и научная обоснованность выводов, представленных в диссертации, определяется использованием апробированных теоретических подходов, а также согласием полученных результатов с результатами теоретических исследований и численных расчетов других авторов. **Оформление диссертационной работы** в целом не вызывает нареканий за исключением ряда орфографических, пунктуационных и стилистических опечаток. Работа написана понятным языком, достаточно полно проиллюстрирована, материал работы изложен ясно и последовательно. Работа написана понятным языком, достаточно полно проиллюстрирована, материал работы изложен ясно и последовательно.

Все представленные в диссертации результаты получены **лично автором либо при его непосредственном участии**, о чем свидетельствуют его свободное владение материалом и первое авторство в большинстве публикаций, в которых изложены основные результаты диссертационной работы. По результатам диссертации опубликованы три статьи в трех рецензируемых журналах, входящих в базы Web of Science и Scopus: Journal of Physical Chemistry A (квартиль Q2 в Scopus), Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics (Q2), European Physical Journal D (Q3).

По диссертации имеются следующие **замечания**.

1. В обзоре литературы упущены некоторые публикации. Так, на с. 5 (2й абзац) было бы уместно упомянуть работы Попова А.М. [Laser Phys. **7**, 844 (1997)], Толстихина О.И. [Phys. Rev. Lett. **111**, 153003 (2013); Phys. Rev. A **93**, 053426 (2016); **94**, 063402 (2016)] и Фролова М.В. [J. Mod. Opt. **62**, S21 (2015)]. На с. 8 — статьи Крайнова В.П. [J. Phys. B **35**, 3515 (2002)] и Попова В.С. [УФН **185**, 3 (2015)]. На с. 14 — работу Я. Кобуса [J. Kobus, Comp. Phys. Commun. **184**, 799 (2013)].
2. В главе 1 исследуется ионизация одноэлектронной (квази)молекулы в приближении «замороженных» ядер. Однако, такая ионизация всегда является диссоциативной, даже для устойчивого иона H_2^+ . Соискателю следовало бы оценить влияние диссоциации на вероятность ионизации.
3. В главе 3 движение ядер рассматривается в классическом подходе в отсутствие обоснований и оценок погрешности такого приближения. Строгое обоснование формулы (3.21) в тексте диссертации также отсутствует.
4. Во всех главах используется различная параметризация огибающей лазерного импульса: в главе 1 \sin^2 , в главе 2 гауссова экспонента, в главе 3 «сглаженная трапеция». Чем обоснован выбор той или иной формы? Как изменятся результаты глав 1 и 2, если в монохроматических множителях формул (1.33) и (2.32) синус заменить косинусом? Чему равна «площадь под кривой», задаваемой формулой (3.16)? Для реальных лазерных импульсов она равна нулю.

5. На с. 32 говорится: «Приближение плоских волн не учитывает увеличение импульса электрона в потенциальной яме вблизи ядер». Однако, в поле ядер импульс электрона не имеет определенного значения, и поэтому говорить о нем бессмысленно. Здесь можно говорить о сближении соседних узлов волновой функции.
6. В разделе 2.1 последовательность изложения материала нарушена: уравнение (2.17) должно располагаться между уравнениями (2.14) и (2.15). В противном случае смысл введения матрицы $\tilde{H}_0^{(m)}$ в формуле (2.15) остается неясным.
7. В тексте диссертации встречаются опечатки, орфографические ошибки и элементы сленга. В частности, слова «пятифотонный», «шестифотонный» (с. 55) и т.д. пишутся слитно. Термины «гамильтониан», «фурье-образ», «гауссов» и т.п. записываются со строчной буквы. В диссертации векторы всюду обозначены жирным шрифтом. Однако, в формулах (1.8) – (1.13) вместо этого использованы стрелки над буквами, а на с. 41 матрица Дирака α указана обычным шрифтом. Подписи к таблицам 3.1 и 3.2 ошибочно сделаны одинаковыми. Различие между этими таблицами видно лишь из текста диссертации и формул (3.22) и (3.23) соответственно. На с. 68 в последнем абзаце п. 3.2 использован некорректный термин «популяции» вместо «заселенности». На сс. 48, 59 сделан не вполне удачный перевод термина «шпуриозные состояния». В конце второго абзаца «Заключения» имеется избыточный фрагмент «от окрестностей двух ядер за счет интерференции волновой функции», не связанный логически с предложением и, возможно, оставшийся после правки не удаленным. В последнем абзаце преамбулы к главе 2 предложение «Конец главы посвящен выходу за пределы дипольного приближения...» следовало бы переформулировать: «В конце главы будет сделан выход за рамки дипольного приближения...». На с. 70 во втором абзаце изложение ведется от первого лица («Рассмотрим...»), что является нормой в статьях, но недопустимо в диссертации. Заголовок пункта 1.4 «Основные результаты первой главы» следовало бы заменить на «Результаты расчета вероятностей ионизации». Заголовок последнего пункта каждой главы «Итоги главы» традиционно принято называть «Выводы к главе». Следовало бы также поставить ударение в словах «большие» в тех случаях, где их можно понимать двояко (с. 44, 2я строка сверху; с. 69, 2й абзац, 7я строка сверху; с. 80, последний абзац, 1я строка сверху). Пояснения к формуле (3.18) сделаны неаккуратно.
8. Библиографические ссылки на некоторые источники оформлены небрежно. В частности, статьи из русскоязычных журналов [41, 96] желательно указывать на языке оригинала. При наличии русского перевода зарубежные книги, например, [72], следует цитировать в русскоязычной версии. В ссылке [79] вместо англоязычной статьи можно было бы указать русскоязычную монографию: Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: «Наука», 1976.

Перечисленные замечания не ставят под сомнение достоверность и значимость полученных результатов и сделанных на их основе выводов. Результаты диссертации Д.А. Крапивина были доложены на нескольких всероссийских и международных конференциях и нашли отражение в шести публикациях, из них три статьи опубликованы в научных журналах из перечня ВАК РФ. Содержание диссертации отражает личный вклад автора в опубликованные работы.

Результаты диссертации могут быть использованы в Институте общей физики РАН, Научно-исследовательском институте ядерной физики МГУ, Российском научном центре «Курчатовский институт», Санкт-Петербургском государственном университете, Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ», Московском физико-техническом институте (государственном университете), Воронежском государственном университете, Институте прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова РАН и других научных центрах.

Заключение по работе. Диссертация Д.А. Крапивина «Электронные переходы в двухатомных квазимолекулах при взаимодействии с импульсами сильного электромагнитного поля» представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, удовлетворяющую всем требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г. в части, касающейся диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук. Основные выводы работы полностью соответствуют ее целям и положениям, выносимым на защиту. Считаем, что Дмитрий Андреевич Крапивин заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Отзыв подготовил профессор кафедры теоретической физики, доктор физико-математических наук А.С. Корнев. Отзыв рассмотрен и одобрен на заседании кафедры теоретической физики 09 февраля 2024 г. (протокол № 4).

Доктор физ.-мат. наук,
профессор кафедры
теоретической физики ВГУ

А.С. Корнев

Доктор физ.-мат. наук,
заведующий кафедрой
теоретической физики ВГУ

М.В. Фролов



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ВГУ»)	
Исполнитель	<u>Корнева А.С.</u>
Исполнитель	<u>Фролова С.В.</u>
Должность	начальник отдела кадров
Подпись	<u>О.И. Зверева</u> 09.02.2024
Расшифровка подписи	

Сведения о ведущей организации:

Федеральное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный университет»

Россия, 394018, г. Воронеж, Университетская пл., 1

Тел. +7 (473) 220-75-21, эл. почта office@main.vsu.ru, сайт www.vsu.ru

Кафедра теоретической физики ВГУ

Тел. +7 (473) 220-87-56, эл. почта thp@phys.vsu.ru