

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по научной работе
Санкт-Петербургского
государственного университета
профессор С. В. Апионов



2017 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертацию Семилетова Ивана Мстиславовича
«Влияние индуцированного и постоянного дипольных моментов на
туннельную ионизацию атомов и двухатомных молекул»,
представленную на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
01.04.02 – теоретическая физика

Актуальность темы диссертации. Диссертация И. М. Семилетова посвящена теоретическому исследованию процессов ионизации атомов и двухатомных молекул в сильном лазерном поле. Исследования нелинейных явлений в атомах и молекулах под действием коротких (фемтосекундных и субфемтосекундных) импульсов лазерного излучения находятся на переднем крае современной атомно-молекулярной физики и оптики, о чем свидетельствуют многочисленные публикации последних лет в наиболее престижных научных журналах. Помимо фундаментального научного интереса, эта область имеет большие практические перспективы, связанные с созданием компактных источников когерентного излучения в ультрафиолетовом и рентгеновском диапазонах, новых методов оптической и электронной спектроскопии, а также детектирования и визуализации сверхбыстрых процессов. Таким образом, актуальность темы

диссертационной работы не вызывает сомнений. Целью работы являлось теоретическое исследование влияния индуцированного и постоянного дипольных моментов на туннельную ионизацию атомов и двухатомных молекул лазерным излучением. Сочетание тематики исследования, формулировки его целей, используемых методов решения задач, области приложения результатов подтверждает, что данная диссертация **соответствует специальности 01.04.02 – теоретическая физика**, по которой она представлена к защите.

Структура и содержание диссертации. Диссертация И. М. Семилетова содержит 127 страниц текста, включая 12 рисунков, 6 таблиц и три приложения. Она состоит из введения, списка сокращений и условных обозначений, трех глав, заключения и списка литературы, включающего 145 ссылок.

Во Введении формулируется цель диссертации, аргументируется ее актуальность, научная новизна и практическая значимость. Представлены выносимые на защиту научные положения, а также сведения о публикациях автора по теме диссертации и апробации работы.

Глава 1 является обзорной. В ней представлено описание различных теоретических методов, которые в той или иной мере использовались при работе над диссертацией. Рассмотрена туннельная ионизация атомов и молекул в постоянном электрическом поле, в том числе при наличии у молекулы постоянного дипольного момента, изложены основы адиабатического приближения Борна — Фока. Один из разделов посвящен обзору приближения Келдыша в теории нелинейной ионизации атома в поле электромагнитной волны и связанных с ним теорий Переломова — Попова — Терентьева и Аммосова — Делоне — Крайнова (АДК). Обсуждается также обобщение теории АДК для молекул (МО-АДК). Рассматриваются современные модификации теории, учитывающие возбуждение иона в конечном состоянии и изменение колебательного квантового числа.

В главе 2 представлены модификации теории туннельной ионизации в лазерном поле. Во-первых, рассматривается обобщение теории на случай сверхкоротких импульсов поля, содержащих небольшое число оптических периодов. Оно основано на адиабатическом приближении и состоит в замене постоянной напряженности электрического поля в формуле Смирнова — Чибисова для скорости туннельной ионизации в постоянном поле на напряженность, зависящую от времени, как от параметра. Полученные таким образом мгновенные скорости ионизации используются затем в качестве коэффициентов в классических балансных уравнениях для заселенностей различных состояний иона, образованного в результате действия поля лазера. Далее изучается влияние индуцированного дипольного момента на туннельную ионизацию атомов. Предлагаемая модификация теории также находится в русле идей адиабатического приближения: вместо постоянного потенциала ионизации атома используется зависящая от времени величина, полученная из энергии начального состояния при учете статического эффекта Штарка с напряженностью электрического поля в данный момент времени. Учитываются поправки второго и четвертого порядка по напряженности поля, вычисляемые с помощью статической поляризуемости и гиперполяризуемости атомов. В качестве примера рассмотрены атомы Ne и Xe; результаты решения балансных уравнений сравниваются с данными исследований других авторов, полученными путем численного решения нестационарных уравнений для матрицы плотности. В этой же главе развит метод учета влияния перерассеяния фотоэлектрона на возбуждение ионного дублета.

Глава 3 посвящена исследованию влияния постоянного дипольного момента на туннельную ионизацию двухатомных полярных молекул лазерным излучением. Отмечается, что дипольный момент остова молекулы существенно влияет на величину констант в асимптотическом выражении для волновой функции активного электрона. Излагается практический метод вычисления этих констант для высшей занятой орбитали полярной

молекулы. Кроме того, индуцированный и постоянный дипольные моменты молекулы и ее иона обуславливают сдвиг уровней энергии во внешнем поле (эффект Штарка). В приближении Борна — Оппенгеймера выводятся общие формулы для вероятности туннельной ионизации полярной молекулы с учетом этих эффектов. Роль постоянного дипольного момента особенно велика для полярных молекул с высшей занятой орбиталью типа σ (то есть, с нулевой проекцией орбитального углового момента на ось молекулы). Проведены расчеты для молекулы CO как с учетом, так и без учета постоянного дипольного момента. Показано, что учет постоянного дипольного момента может изменить выход ионов в 3.5 раза при ионизации лазерным импульсом с длительностью 100 фс.

В Заключение сформулированы основные результаты работы.

В Приложениях А, Б и В содержатся промежуточные вычисления.

Научная новизна исследования. Диссертационная работа И. М. Семилетова представляет собой цельное, обладающее новизной исследование по направлению, широко изучаемому в мировом научном сообществе в последние годы. Новизна наиболее существенных результатов заключается в следующем: теоретически исследовано возбуждение тонкой структуры мультиплета без изменения главного квантового числа посредством перераспределения фотоэлектрона на родительском ионе; оценены границы применимости классических балансных уравнений при туннельной ионизации атомов; показано, что постоянный дипольный момент не оказывает влияния на ионизацию полярных молекул в многофотонном режиме, но проявляется в туннельном режиме.

Практическая значимость работы. Предложенные в диссертации теоретические методы позволяют анализировать физические явления, возникающие при взаимодействии атомов и молекул с сильными лазерными полями. Их практическая реализация не требует использования значительных

вычислительных ресурсов. Разработанный простой алгоритм позволяет вычислять выход атомных и молекулярных ионов в заданных состояниях в зависимости от параметров лазерного излучения.

Достоверность результатов и **научная обоснованность** выводов, представленных в диссертации, определяется применением апробированных теоретических подходов, а также согласием полученных результатов с результатами теоретических исследований и численных расчетов других авторов. **Оформление диссертационной работы** не вызывает нареканий. Работа написана хорошим литературным языком, достаточно полно проиллюстрирована, материал работы изложен ясно и последовательно.

По диссертации имеются следующие **замечания**:

1. Представляется, что использование квазистатического приближения для скорости ионизации с последующим применением классических балансных уравнений в случае сверхкоротких лазерных импульсов требует более серьезного обоснования. Применение самой концепции скорости ионизации в этом случае не имеет очевидных преимуществ. Более естественным является описание в терминах амплитуды ионизации и абсолютной вероятности ионизации. Подтверждением применимости предложенного в диссертации подхода было бы, например, сравнение с результатами точных квантовомеханических расчетов для простейшей системы — атома водорода, которые широко представлены в научной литературе.
2. Учет индуцированного дипольного момента в показателе экспоненты в формуле для скорости туннельной ионизации можно рассматривать скорее как интуитивный подход в духе адиабатического приближения, а не теоретически обоснованное уточнение формул Смирнова — Чибисова или АДК. Такое уточнение можно было бы получить с помощью корректного вычисления предэкспоненциального множителя в виде ряда по степеням внешнего поля, но это непростая задача. В тексте диссертации отмечается,

что вопрос о влиянии индуцированного дипольного момента на вероятность туннельной ионизации не является тривиальным, и ответ на него представлял бы несомненный интерес. Сделанные в диссертации расчеты для атомов Ne и Xe, однако, не позволяют однозначно утверждать, что учет индуцированного дипольного момента в показателе экспоненты улучшает согласие с результатами квантовомеханических расчетов на основе матрицы плотности.

3. Для сравнения с расчетами по методу матрицы плотности в работе N. Rohringer and R. Santra, Phys. Rev. A **79**, 053402 (2009) заселенности ионных состояний, представленные на рис. 2.2 и 2.3, были перенормированы. Не совсем понятно, почему для сравнения не использовались значения заселенностей, полученные непосредственно при решении балансных уравнений. Означает ли это, что при расчете по методу, предложенному в диссертации, не наблюдается насыщение ионизации для данных значений параметров лазерного поля (в отличие от расчета в цитированной выше статье) и суммарная заселенность ионных состояний отлична от единицы?

Перечисленные замечания не ставят под сомнение достоверность и значимость полученных результатов и сделанных на их основе выводов. Результаты диссертации И. М. Семилетова были доложены на нескольких международных конференциях и нашли отражение в семи 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, Национальном исследовательском центре «Курчатовский институт», Институте прикладной физики РАН, Московском государственном университете им. М. В. Ломоносова, Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ», Санкт-Петербургском государственном университете, Воронежском государственном

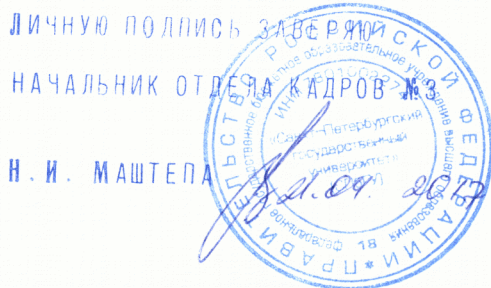
университете, Московском физико-техническом институте (государственном университете) и других научных центрах.

Заключение по работе. Диссертация И. М. Семилетова «Влияние индуцированного и постоянного дипольных моментов на туннельную ионизацию атомов и двухатомных молекул» представляет собой законченную 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. Автореферат диссертации правильно и полно отражает ее основное содержание, научную новизну, выводы и другие ключевые моменты. Считаем, что Иван Мстиславович Семилетов заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Отзыв подготовил профессор кафедры квантовой механики, доктор физико-математических наук Д. А. Тельнов. Отзыв рассмотрен и одобрен на заседании кафедры квантовой механики 21 апреля 2017 г. (протокол № 24).

Доктор физ.-мат. наук, профессор
кафедры квантовой механики СПбГУ

Д. А. Тельнов



Документ подготовлен
в порядке исполнения
трудовых обязанностей

Доктор физ.-мат. наук, профессор
кафедры квантовой механики СПбГУ
с возложенными обязанностями
заведующего кафедрой



В. М. Шабаев

Личную подпись заверяю
начальник отдела кадров № 2
Н. И. Маштепа



Документ подготовлен
в порядке исполнения
трудовых обязанностей

Сведения о ведущей организации:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»
Россия, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб. 7-9.

Тел. +7 (812) 328-20-00, эл. почта spbu@spbu.ru, сайт <http://spbu.ru>

Кафедра квантовой механики СПбГУ, тел. +7 (812) 428-45-52, эл. почта
qmec@spbu.ru, сайт <http://fock.phys.spbu.ru>