

ОТЗЫВ

официального оппонента 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

Диссертация Семилетова И.М. посвящена теоретическому исследованию влияния наведенного и постоянного дипольных моментов на туннельную ионизацию атомов и двухатомных молекул. В работе в рамках адиабатического приближения исследована динамика заселенностей состояний тонкой структуры ионов инертных атомов, получаемых под воздействием ультракороткого лазерного импульса, и ее изменение при учете индуцированного дипольного момента. Вычислен вклад перерассеяния фотоэлектрона в возбуждение тонкой структуры иона. Продемонстрировано существенное влияние постоянного дипольного момента двухатомной молекулы с высшей занятой σ -орбиталью на величину выхода ионов в туннельном режиме ионизации лазерным полем.

Актуальность исследования

Активное теоретическое и экспериментальное исследование многочисленных эффектов, протекающих под воздействием сверхкоротких лазерных импульсов, длительность которых может оказываться в аттосекундном диапазоне, позволяет, в частности, изучать динамику атомных и молекулярных электронов, а также динамику движения ядер в молекулах. Данная информация представляет несомненный интерес не только для физики атомов и молекул, но и для химии простейших систем.

В качестве примеров здесь можно привести выявление когерентности волновых функций основного и возбужденного состояний образованного иона,

а также повышение на порядок точности в экспериментальном определении вероятности ионизации атомов и молекул лазерным излучением.

Для молекул картина взаимодействия с лазерным излучением усложняется наличием дополнительных степеней свободы, но при этом открываются новые горизонты в исследовании распространения лазерного излучения в атмосфере.

Для интерпретации имеющихся экспериментальных данных и планирования новых экспериментов требуются достаточно простые и физически обоснованные теоретические модели. Расчеты из первых принципов, основанные на численном решении зависящего от времени уравнения Шредингера для волновой функции, либо уравнения фон Неймана для матрицы плотности, имеют существенный недостаток: они дают лишь численный результат и не позволяют выявить и обосновать общие закономерности физических процессов. Для молекул существующая теория туннельной ионизации разработана не настолько подробно в сравнении с атомами. Поэтому развитие такой теории представляется весьма актуальной задачей.

Структура и объем диссертационной работы

Диссертация изложена на 127 страницах, состоит из введения, списка сокращений и условных обозначений, трех глав, заключения, трех приложений и списка литературы из 145 наименований.

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

Первая глава содержит подробный анализ существующих теоретических моделей и подходов для описания туннельной ионизации атомов и молекул лазерным излучением. Основные акценты сделаны на теорию туннельной ионизации (теорию Келдыша) и адиабатическое приближение для описания воздействия переменного внешнего поля на квантовые системы. Данные модели лежат в основе проведенных в диссертации исследований.

Во второй главе на основе адиабатического приближения и учета возбуждения остаточного иона (модель Карлсона–Зона) развита теория туннельной ионизации атомов ультракоротким лазерным импульсом, содержащим небольшое количество осцилляций. В отличие от теории Аммосова–Делоне–Крайнова (АДК) здесь не производится усреднение по периоду лазерного излучения. Теория учитывает влияние наведенного дипольного момента, для чего в рамках адиабатического приближения предложена простая модель. Заселенность состояний тонкой структуры вычислена из решения классических балансных уравнений. Проведено сравнение предложенной теории с результатами численного интегрирования уравнения фон Неймана. На примере атома ксенона продемонстрирована необходимость учета влияния наведенного дипольного момента. Также проведен анализ вклада перерасеяния фотоэлектрона в возбуждение тонкой структуры остаточного иона. В отличие от широко используемого алгоритма сечение рассеяния фотоэлектрона на ионе вычислено не эмпирически, а численно на основе метода сильной связи каналов. Сделана нижняя оценка длительности импульса (4 – 5 осцилляций) для применимости классических балансных уравнений к задаче туннельной ионизации лазерным полем.

В третьей главе исследовано влияние постоянного дипольного момента на туннельную ионизацию полярной молекулы лазерным излучением. Использована современная модель туннельной ионизации молекул, учитывающая колебания ядер. Влияние постоянного дипольного момента учтено в рамках адиабатического приближения. Показано, что оптимальной для наблюдения эффекта является σ -симметрия активной орбитали. В качестве примера рассмотрена молекула монооксида углерода. Продемонстрирована существенная роль постоянного дипольного момента в туннельной ионизации лазерным излучением. Показано, что его влияние не исчезает ни после усреднения по случайным ориентациям молекулы, ни после интегрирования плотности ионов по фокальному объему лазерного пучка.

В заключении сформулированы основные результаты диссертации.

В приложении приведены промежуточные результаты аналитических преобразований, а также изложены нетривиальные алгоритмы численных расчетов.

Степень обоснованности и достоверность научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации

Изложенные в диссертационной работе научные положения получены при использовании современных методов теоретической физики и представляются вполне обоснованными. Апробация диссертационной работы проводилась на международных научных конференциях, основные результаты достаточно полно изложены в 8 публикациях по теме исследования, 3 из которых включены в перечень, рекомендованный ВАК РФ. Достоверность полученных результатов обеспечивается корректной постановкой исследовательских задач, проверкой разработанных методов на контрольных примерах, сравнением при наличии возможности с результатами других авторов.

Новизна научных положений и результатов

К наиболее значимым новым результатам, представленным в диссертационной работе, можно отнести важную роль индуцированного дипольного момента в туннельной ионизации атомов сверхкороткими лазерными импульсами, поскольку в литературе отсутствуют результаты подобных исследований.

Автореферат правильно и полно отражает содержание диссертации.

Замечания к диссертационной работе

К работе имеются три замечания.

1. В разделе 1.2 излагается адиабатическое приближение Борна–Фока, которое используется в нулевом порядке на протяжении всей диссертационной работы, но ничего не сказано об адиабатическом приближении Ландау–Дыхне, не менее важном в теории Келдыша.

2. В разделе 2.5 при обсуждении кратковременного выхода в надбарьерный режим ионизации (с. 58–60) цитируются работы И.И. Фабриканта [40] и С.В. Попруженко [57], но отсутствует ссылка на публикацию Q. Zhang, P. Lan, P. Lu, Phys. Rev. A 90, 043410 (2014).

3. В формуле (3.21) суммирование проводится по всем допустимым значениям проекции орбитального момента m' на направление вектора напряженности электрического поля, в то время как в теории туннельной ионизации доминирующим является лишь вклад с нулевой проекцией момента. В этом смысле формула (3.21) содержит превышение точности, даваемой квазиклассическим приближением, лежащим в основе теории туннельной ионизации.

Представленные выше замечания носят рекомендательный характер и не снижают общей высокой оценки работы. Диссертация Семилетова Ивана Мстиславовича «Влияние индуцированного и постоянного дипольных моментов на туннельную ионизацию атомов и двухатомных молекул» является законченной научно-квалификационной работой. Диссертационная работа полностью соответствует всем критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней, а также паспорту специальности 01.04.02 — «Теоретическая физика», а ее автор, Семилетов Иван Мстиславович, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 — «Теоретическая физика».

д. ф.-м. н., г.н.с.

В.А. Астапенко

10.05.2017

Адрес электронной почты: astval@mail.ru

Телефон: 8-962-993-89-04

Адрес: 141700, г. Долгопрудный, Московской обл., Институтский пер, 9

Подпись и сведения заверяю:

Ученый секретарь МФТИ (ГУ)

к.ф.-м.н.



Скалько Юрий Иванович