

ОТЗЫВ

официального оппонента, кандидата физ.-мат. наук Рябикина Михаила Юрьевича 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 И.М. Семилетова посвящена проблемам аналитического описания влияния индуцированного и постоянного дипольных моментов на туннельную ионизацию атомов и двухатомных молекул. Тема представляется несомненно актуальной ввиду того, что корректное описание процессов лазерной ионизации газов необходимо для понимания многих явлений современной нелинейной оптики и атомной физики, среди которых такие широко исследуемые в настоящее время явления фемтосекундной оптики, как филаментация мощных лазерных пучков, ионизационная самокомпрессия импульсов, генерация терагерцового излучения при оптическом пробое газов и др., а также подавляющее большинство явлений аттосекундной физики. Разработанные в диссертации аналитические подходы дают возможность адекватного моделирования ряда особенностей ионизационных процессов без привлечения сложных вычислений с использованием суперкомпьютеров, что представляет несомненный научный и прикладной интерес.

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, трех приложений и списка литературы из 145 наименований.

Во введении обосновывается актуальность диссертационной работы, формулируются ее цели, методы проведения исследований, обсуждаются научная новизна, практическая значимость и степень достоверности полученных результатов, излагаются основные защищаемые положения, приводятся сведения об апробации результатов, их публикации, личном вкладе диссертанта, структуре и объеме диссертации.

Первая глава носит обзорный характер. В ней приводятся краткие сведения об имеющихся в литературе данных (в том числе результатах, полученных ранее в научном коллективе, в котором выполнялась данная диссертационная работа), относящихся к затрагиваемым в диссертации вопросам. При изложении вопросов, относящихся к туннельной ионизации сложного атома постоянным полем, особое внимание уделено приближению Бейтса–Дамгаард, являющемуся теоретической основой для исследования туннельной ионизации, и одноэлектронному приближению для скорости туннелирования электрона из потенциала с кулоновской асимптотикой (формула Смирнова–Чибисова). Для линейных молекул

изложены принципы обобщения данной теории путем учета нарушения сферической симметрии потенциала; вводится важное для данной диссертации понятие о структурных факторах, учитывающих эту асимметрию; для полярных молекул подчеркивается важная роль линейного эффекта Штарка. Далее излагается адиабатическое приближение, являющееся основным в данной диссертации, после чего следует обзор теории Келдыша и ее развития за рамки случая короткодействующего потенциала (теория Переломова-Попова-Терентьева (ППТ) и Аммосова-Делоне-Крайнова (АДК) для атомов и ее обобщение на случай молекул (теория МО-АДК)). Наконец, приводится обзор современных модификаций вышеописанных методов, позволяющих учесть влияние внутренних степеней свободы (многоэлектронных эффектов и движения ядер) на туннельную ионизацию атомов и молекул.

Вторая глава посвящена задачам модификации теории Келдыша для рассмотрения ионизации в произвольном (в том числе ультракоротком) лазерном импульсе и учета возбуждения образованного иона («неупругий туннельный эффект»). Далее в адиабатическом приближении исследуется эволюция наведенного дипольного момента в нейтральном атоме (рассмотрен случай благородных газов) и его влияние на туннельную ионизацию атомов. В этом контексте рассмотрены конкретные случаи атомов неона и ксенона и проведено сравнение с имеющимися в литературе данными *ab initio* расчетов на основе уравнения фон Неймана для матрицы плотности. Для случая ксенона продемонстрировано значительное улучшение согласия с данными *ab initio* расчетов в случае использования развитого в диссертации подхода, учитывающего влияние наведенного дипольного момента. Далее рассмотрен вопрос о роли механизма возбуждения остова родительского иона, связанного с перерассеянием электрона; выяснено, что доминирующую роль в возбуждении остова играет неупругий туннельный эффект. В заключение данной главы, подытоживая проведенные в этой главе исследования, автор обсуждает возможные причины расхождений в результатах развитого в диссертации подхода и *ab initio* расчетов для рассмотренных атомов. В частности, анализируются границы применимости используемых в диссертации классических балансных уравнений.

Третья глава посвящена задаче о туннельной ионизации полярных молекул лазерным излучением. Для систем рассматриваемого здесь типа важную роль могут играть постоянные дипольные моменты исходной молекулы и образующегося иона. В первых трех разделах рассмотрены различные (постоянный и наведенный) типы дипольного момента в молекулах и влияние этих дипольных моментов на характеристики электронной и ядерной подсистемы как в отсутствие внешних полей (асимптотика волновой функции активного электрона), так и при воздействии постоянных или переменных внешних полей (эффект Штарка, изменение колебательных параметров молекулы). Далее в приближении Борна–

Оппенгеймера выводятся общие формулы для вероятности туннельной ионизации полярной молекулы постоянным и монохроматическим полями с учетом обсужденных в первой главе структурных эффектов и влияния рассмотренных в начале третьей главы дипольных моментов. В заключительных разделах данной главы развитый формализм применен для исследования туннельной ионизации молекулы CO в постоянном и переменном поле. Проведено сравнение результатов вычислений вероятности ионизации молекулы с учетом и без учета постоянного дипольного момента для случаев (1) постоянного поля, (2) монохроматического излучения и (3) реалистичного пространственно-временного распределения поля, моделируемого гауссовой огибающей по времени и гауссовым распределением по диаметру пучка. Для ориентированного ансамбля молекул продемонстрировано наличие сильной угловой зависимости скорости ионизации как в постоянном, так и в монохроматическом поле, при этом различие в вероятностях ионизации молекулы с учетом и без учета постоянного дипольного момента достигает одного порядка. Для случайной ориентации молекул усреднение по углам уменьшает это различие, но, тем не менее, оно достигает примерно 3.5 раз как для монохроматического излучения, так и для близкого к реальному переменного поля.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертации.

В приложении представлены подробности промежуточных вычислений.

Переходя к оценке работы в целом, следует отметить, что автором получен ряд новых результатов, вносящих заметный вклад в теорию туннельной ионизации атомов и молекул. Результаты проведенных исследований показывают, что развитые в диссертации теоретические подходы представляют собой адекватные обобщения имеющихся в настоящее время версий теории ионизации на случаи ультракоротких лазерных импульсов, позволяя, в частности, учесть такие явления, как возбуждение ионизируемых систем внешним полем и влияние различных типов дипольных моментов на ионизацию. Особенно впечатляют результаты, относящиеся к ионизации молекул, являющихся значительно более сложными и гораздо менее исследованными объектами, чем атомы; при этом предсказываемые теорией эффекты качественно согласуются с недавними результатами, например, показывающими важную роль постоянного дипольного момента при ионизации полярных молекул [L. Holmegaard et al., *Nature Phys* 6, 428 (2010)]. Результаты диссертации, несомненно, являются новыми, физически интересными и весьма перспективными в плане возможных приложений. Развитые подходы апробированы на конкретных примерах тех атомов и молекул (Ne, Xe, CO), которые широко используются в современных экспериментальных исследованиях различных явлений фемто- и аттосекундной физики, при этом рассмотрены интервалы длин волн и интенсивностей, наиболее характерные для данных явлений; более того, рассмотрены и случаи реалистичных лазерных импульсов и

пучков, что еще более подчеркивают практическую значимость полученных результатов. Научные положения, выводы и рекомендации, сформулированные в диссертации, представляются полностью обоснованными. Их получение в значительной мере основано на использовании известных и апробированных методов, применяемых в квантовой механике, атомной и лазерной физике. Достоверность полученных теоретических результатов подтверждается их хорошим согласием с имеющимися экспериментальными данными, а также согласием между результатами аналитических и численных расчетов.

По работе имеются некоторые замечания.

1. В обзорной части диссертации (стр. 26) указывается, что дипольное (точнее было бы сказать «электродипольное») приближение справедливо, «когда длина волны излучения значительно превышает размер области локализации связанного электрона». В последние годы появилось значительное количество работ, где критически обсуждается справедливость этого критерия, часто приводимого как в научной, так и в учебной литературе. Возникло понимание того, что этот критерий, справедливый для однофотонных процессов (причем, только в случае достаточно слабого поля), не является, вообще говоря, корректным для многофотонных процессов. В многофотонных процессах (например, при надпороговой ионизации) электрон может приобретать большую энергию за счет поглощения большого числа фотонов, при этом, соответственно, фотоны могут передавать ему большой суммарный импульс в направлении распространения светового пучка (световое давление). При длинах волн 800 нм этот эффект мал (но уже наблюдаем, см. эксперименты [C.T.L. Smeenk et al., Phys. Rev. Lett. 106, 193002 (2011); A. Ludwig et al., Phys. Rev. Lett. 113, 243001 (2014)]), а с увеличением длины волны λ лазерного излучения его роль резко возрастает, т.к. пондеромоторная энергия электрона пропорциональна λ^2 , а энергия фотона обратно пропорциональна λ . Как следствие, уже на длинах волн порядка 2-5 мкм (намного больше размера области локализации связанного электрона!) в многофотонных процессах может участвовать очень большое число фотонов, что приводит к значительным эффектам светового давления (а, значит, и нарушения электродипольного приближения) уже при интенсивностях лазерного излучения порядка 10^{14} Вт/см² (см. [H.R. Reiss, JOSA B 7, 574 (1989)], а также обсуждение и ссылки в недавней работе [S. Chelkowski, A.D. Bandrauk, and P.B. Corkum, Phys. Rev. A 95, 053402 (2017)]). Хотя вышеупомянутые эффекты светового давления вряд ли заметно изменят вычисленные в диссертации вероятности ионизации в рассмотренных интервалах параметров, следует все же более аккуратно относиться к применимости используемых приближений.

2. В диссертации развивается «модифицированная теория Келдыша для коротких импульсов». Однако место этого исследования в ряду других работ на данную тему не указывается. Теоретические исследования, направленные на

расширение теории ионизации на случай ультракоротких лазерных импульсов, велись уже с начала 2000 г.г. Пионерские работы в этом направлении были выполнены В.С. Поповым [Письма в ЖЭТФ 73, 3 (2001); ЖЭТФ 120, 315 (2001)], Г.Л. Юдиным и М.Ю. Ивановым [Phys. Rev. A 64, 013409 (2001)], а также, как известно, самим Л.В. Келдышем (текст его ранее не опубликованной работы 2001 г. в настоящее время доступен: <http://ufn.ru/dates/pdf/keldysh/keldysh05082016.pdf>). В диссертации (даже в обзорной части) эти работы не только не обсуждаются, но и не упоминаются.

3. На стр. 35 указано, что для атома Ne и иона Ne⁺ радиальный интеграл перекрытия волновых функций, соответственно, остова до ионизации и иона после ионизации равен 0.997, однако на стр. 46 указано, что квадрат этого интеграла для неона равен 0.968. Остается непонятным, чему же все-таки равен данный интеграл.

4. На рис. 2.3 зачем-то изменен по сравнению с рис. 2.2 стиль кривых, соответствующих расчетам данной работы с учетом и без учета наведенного дипольного момента: на рис. 2.2 это, соответственно, пунктирная и сплошная линии, а на рис. 2.3 – наоборот. Это затрудняет восприятие и сравнение рисунков 2.2 и 2.3 (соответственно, для неона и ксенона). Кроме того, в конце подписи к рис. 2.5 следовало бы добавить «по сравнению с рис. 2.2 и 2.3».


5. В таблице 3.1 приведены вычисленные в данной работе структурные факторы для молекулы CO и, для сравнения, значения этих факторов, вычисленные путем пересчета к другим обозначениям данных, полученных С.Д. Лином с соавторами. В качестве ссылки на работу Лина дана ссылка [36] на статью 2002 г. В то же время в статье диссертанта [13] дается ссылка на другую работу Лина, а именно – на статью [37] 2010 г. Следует отметить, что в таблице III статьи Лина [37] приведены данные как из работы [36], так и новые данные, рассчитанные с использованием современных квантовохимических кодов. Остается непонятным, с какими из этих данных проводится сравнение в таблице 3.1 диссертации. Если имеются в виду данные 2002 г., то непонятно, почему не привести более современные данные. Кроме того, приведенная сравнительная таблица не сопровождается какими-либо выводами.

6. Автор часто употребляет словосочетание «ионизация электрона» вместо принятых в русскоязычной литературе терминов «ионизация атома/молекулы» или «отрыв электрона».

Отмеченные замечания не касаются принципиальных сторон проведенного в работе теоретического исследования и не снижают высокой оценки уровня проделанной диссертантом работы и значимости полученных результатов. Результаты работы опубликованы в ведущих рецензируемых журналах, докладывались на представительных российских и международных конференциях и известны специалистам в области, к которой относится данное исследование. Автореферат достаточно полно отражает содержание диссертации.

Работа полностью соответствует критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, а ее автор, Семилетов Иван Мстиславович, несомненно заслуживает присвоения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика.

Официальный оппонент



Рябикин Михаил Юрьевич

кандидат физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник ИПФ РАН

12.05.2017

ФГБНУ «Федеральный исследовательский центр
Институт прикладной физики Российской академии наук»
603950 Россия, г. Нижний Новгород, БОКС - 120, ул. Ульянова, 46
Тел.: +7(831)4164953; email: mike@ufp.appl.sci-nnov.ru

Подпись Рябикина Михаила Юрьевича заверяю.

Ученый секретарь ИПФ РАН
кандидат физ.-мат. наук



И.В. Корюкин