

ОТЗЫВ

члена разового диссертационного совета ЛТФ, доктора физико-математических наук Руднева В. А., о диссертации Серова Владислава Викторовича на тему «Расчет ионизации и диссоциации атомов и молекул сверхкороткими лазерными импульсами и ударами частиц» на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.3. — «Теоретическая физика», представленной в разовый диссертационный совет ЛТФ на базе Объединённого института ядерных исследований

Объектом исследования диссертации являются процессы ионизации атомов и молекул короткими лазерными импульсами и ударами быстрых частиц, а также диссоциации молекул. В диссертации разработаны новые методы расчета полностью дифференциального сечения ионизации и диссоциации атомов и молекул путем численного решения многомерных уравнений Шредингера для систем нескольких взаимодействующих частиц, проведены соответствующие расчеты, проделано сравнение с экспериментом и предложены теоретические модели для интерпретации наблюдаемых явлений. Также предсказаны новые эффекты, которые потом были найдены в эксперименте, в частности явление самопроизвольного нарушения симметрии диссоциации молекулярного водорода под действием поля испущенного электрона. **Актуальность** и значимость темы диссертационной работы не вызывает сомнений. Современные технологии создания мощных сверхкоротких лазерных импульсов позволяют измерять и контролировать быстро протекающие процессы в атомах и молекулах, в частности исследовать ультрабыструю динамику электронов. Получаемые данные, при их корректной теоретической интерпретации, позволяют прояснить фундаментальные проблемы квантовой механики, такие как например вопрос мгновенности туннелирования.

Научная и практическая ценность проведенных автором диссертации исследований несомненна. В диссертации подробно представлены завершённые научные исследования, давшие результаты для теоретической физики. Результаты диссертации могут быть использованы при проведении дальнейших экспериментальных - включая вычислительный эксперимент - и теоретических исследований в области физики атомов и молекул и квантовой механики, проводимых в ОИЯИ (Дубна), СПбГУ, НИИЯФ МГУ (Москва), Воронежский государственный университет и других российских и зарубежных научных центрах. **Новизна результатов** диссертации очевидна. Значимость и новизна результатов подтверждается высоким уровнем журналов, в которых опубликованы статьи по материалам диссертации (Physical Review A, Physical Review Letters, Nature Communications и др.), и высоким уровнем цити-

рования этих статей.

Обоснованность полученных результатов определяется сравнением результатов теоретических расчетов автора диссертации с экспериментальными данными и результатами теоретических расчетов других авторов, выполненных часто в рамках более простых моделей. **Достоверность** полученных результатов не вызывает сомнений. **Личный вклад** Серова Владислава Викторовича в исследованиях, отраженных в диссертации, был определяющим.

Диссертация состоит из Введения, четырех глав, Заключения и списка литературы. Во **Введении** обсуждается современное состояние исследований ионизации и диссоциации атомов и молекул сверхкороткими импульсами и ударами быстрых частиц, обосновывается актуальность исследования, формулируются цели и задачи исследования. Здесь также приведены основные положения, выносимые на защиту.

В **первой главе** рассматривается применение сверхкоротких лазерных импульсов для измерения сверхбыстрых процессов при ионизации атомов и молекул. Кратко представлены наиболее распространенные методы измерения продолжительности ионизации, введены понятия данной области и описана проблема интерпретации угла сдвига атточасов. Проведены расчеты для метода атточасов и RABBIT для атомов инертных газов и различных молекул, включая молекулы водорода и воды. Показаны физический смысл и причины появления сингулярностей в угловых распределениях задержки испускания электрона при ионизации двухцентровых систем.

Во **второй главе** описаны расчеты однофотонной и двойной фотоионизации двухэлектронных молекул и атомов, используя фотон жесткого ультрафиолетового или мягкого рентгеновского диапазона. Представлены результаты расчетов диссоциативной фотоионизации молекул водорода, двойной фотоионизации молекулы водорода и интерпретация зависимости многократного дифференциального сечения от углов и энергии испускаемых электронов. Описаны результаты расчетов двойной фотоионизации атома гелия и гелиеподобных ионов и исследована зависимость корреляционного параметра от заряда ядра и энергии испущенных электронов.

В **третьей главе** описывается исследование процессов, происходящих при взаимодействии быстрых заряженных частиц с молекулами и атомами. В начале главы описываются результаты расчетов многократного дифференциального сечения одинарной и двойной фотоионизации атомов и молекул методами теоретического моделирования. Их сравнивают с экспериментальными данными. Далее, описывается упрощенная модель для перезарядки-ионизации атома гелия быстрым протоном. Она позволяет изучать причины некорректной работы теоретических методов, используемых в реальных расчетах данного процесса, и объяснять отклонения результатов от

экспериментальных данных. В последней части главы описывается предсказанный эффект отложенного влияния испущенного фотоэлектрона на симметрию диссоциации молекулы водорода. Это происходит через прямое воздействие испущенного электрона на остаточный ион, которое происходит уже после того, как электрон удалится на большое расстояние от остаточного иона. Представлены экспериментальные данные, подтверждающие существование данного эффекта.

Четвертая глава диссертации посвящена численным методам, используемым для выполнения расчетов, в том числе методам, разработанным автором. Рассматриваются методы расчета амплитуд ионизации, решения задачи рассеяния на двухэлектронной молекуле, метод сопутствующих координат, метод быстрого ортогонального сферического преобразования Бесселя, приближение одного активного электрона, а также приложение принципов параксиальной оптики для расчета рассеяния быстрого электрона на молекуле. Представлены численные схемы решения уравнений Шредингера на основе различных методов.

В **Заключении** резюмируются основные результаты проведенных исследований. Они в полной мере соответствуют положениям, выносимым на защиту.

Диссертация написана ясным языком, с малым количеством опечаток и с приведением всех необходимых формул. Численные результаты представлены в виде графиков и таблиц. Проведенные исследования описаны подробно и ясно, с обоснованием основных положений и аккуратным цитированием использованной литературы. Автор демонстрирует хорошее знание современного состояния исследований в данной области, а новизна и значимость проведенных исследований очевидны.

В своей диссертации В.В. Серов демонстрирует широкую научную эрудицию и высокую квалификацию не только в сфере теоретических моделей атомных и молекулярных процессов и их численном исследовании, но и в современных методах эксперимента. К сильным сторонам диссертации можно отнести актуальность выбранных автором направлений исследований, их фундаментальную проработку, большой объём проделанной теоретической и вычислительной работы.

По содержанию и оформлению диссертации можно сделать следующие **замечания**:

1. Автор не всегда своевременно раскрывает используемые им аббревиатуры. Так, на странице 24 имеется отсылка к методу t-SURFFc, но расшифровка названия метода заменена отсылкой к четвёртой главе диссертации, что несколько затрудняет восприятие текста.
2. Хотя в целом изложение ведётся хорошим, ясным языком, в тексте, особен-

но начиная с главы 2, имеется не слишком большое, но заметное количество орфографических и стилистических ошибок, затрудняющих чтение.

3. Обозначения на рисунках не всегда соответствуют обозначениям на подписях к ним и в основном тексте (например, рисунок 4.4).
4. Не всегда (например, в разделе 4.2) должное внимание уделено описанию границ применимости сделанных приближений.
5. Отдельные утверждения автора нуждаются в дополнительных пояснениях. Например, на странице 236: “основное состояние становится меньше шага сетки задолго до того, как достигается сходимость сечения. Однако, для кулоновских потенциалов эта проблема несущественна, так как связанные состояния коллапсируют в узел, ближайший к ядру.”

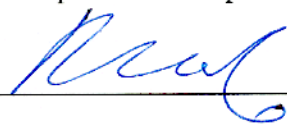
Сделанные замечания не снижают общей высокой оценки представленной работы.

В целом, диссертация представляет собой законченное научное исследование – научно-квалификационную работу, в которой содержится решение задачи, имеющей существенное значение для физики атомных и молекулярных систем и фотоники. Основные результаты диссертации докладывались на международных конференциях и своевременно опубликованы в ведущих российских и международных научных журналах.

Автореферат правильно отражает содержание диссертации.

Могу с уверенностью утверждать, что рассматриваемая работа удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым Квалификационной комиссией ОИЯИ, ВАК и Минобрнауки РФ к докторским диссертациям, а ее автор, Серов Владислав Викторович, безусловно заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.3. – «Теоретическая физика».

Член разового диссертационного совета ЛТФ



Руднев Владимир Александрович

доцент

19.05.2023 г.

кафедры вычислительной физики Санкт-Петербургского государственного университета, д.ф.-м.н.,

ул. Ульяновская, д. 1, Петергоф, Санкт-Петербург, 198504

тел.: +7(812)4284533; e-mail: v.rudnev@spbu.ru

Даю согласие на обработку моих персональных данных любым законодательно разрешенным способом.



Текст документа размещен
в открытом доступе
на сайте СПбГУ по адресу
<http://spbu.ru/science/expert.html>