

ОТЗЫВ

официального оппонента д.ф.-м.н. Попруженко Сергея Васильевича
на диссертационную работу Поповой Марии Михайловны
«Когерентный контроль при ионизации атомов
электромагнитными полями кратных частот»,
представленную на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук по специальности 1.3.6. Оптика

Диссертационная работа М.М. Поповой посвящена развитию теоретических методов описания нелинейных оптических процессов, происходящих при воздействии электромагнитного поля, состоящего из двух или более компонент с кратными частотами, на атомы. Основной задачей работы является поиск новых возможностей описания когерентного контроля процесса ионизации внешних оболочек сложных атомов в бихроматическом и многочастотном электромагнитном поле. Непосредственным предметом исследования являются спектрально-угловые распределения фотоэлектронов, возникающих при ионизации атомов гелия и неона в таких полях.

В последние несколько десятилетий активно развивается область физики, посвященная изучению взаимодействия излучения, состоящего из нескольких частотных компонент, с атомами и молекулами. При этом в качестве основной компоненты с несущей частотой ω обычно используется лазерное излучение относительно высокой интенсивности, а компоненты кратных частот получают либо при помощи нелинейного преобразования во вторую или третью гармонику с помощью кристалла, либо в процессе генерации гармоник высокого порядка (ГГВП), возникающей при взаимодействии лазерного импульса оптического или инфракрасного диапазона частот с газовыми мишенями. В последнем случае возникает излучение с частотами в десятки ω , а когерентное сложение этих частотных компонент позволяет, при условии надежного контроля за их относительными фазами, получать электромагнитные импульсы сверхмалой длительности, вплоть до нескольких десятков аттосекунд. Лабораторные исследования процесса ГГВП и разработка на его основе методов получения ультрафиолетового и мягкого рентгеновского излучения экстремально короткой длительности привели к созданию нового направления исследований – аттосекундной физики, за вклад в развитие которой была присуждена Нобелевская премия 2023 года.

Важным разделом аттосекундной физики и метрологии являются экспериментальные методы, позволяющие реконструировать амплитуду и фазу гармоники лазерного излучения. Контроль этих величин является ключевым элементом процедуры создания сверхкоротких импульсов с заданными частотно-временными и поляризационными свойствами. В значительной мере эти методы основаны на наблюдении процесса ионизации в двух- или многочастотных полях. Спектрально-угловые распределения фотоэлектронов, возникающих в результате таких процессов,

чувствительны к характеристикам излучения. Соответственно, умение рассчитывать эти распределения с контролируемой точностью является важнейшим инструментом в протоколах реконструкции структуры полихроматических электромагнитных полей, в частности, полей высоких гармоник лазерного излучения. Несмотря на то, что в экспериментах обычно используется немного частотных компонент, и напряженности электромагнитных полей не слишком велики, так что в каждом акте ионизации участвует небольшое число фотонов, задача расчета спектрально-угловых распределений фотоэлектронов отнюдь не является простой. Основная сложность здесь – в необходимости учета многоэлектронной структуры атома в рамках различных схем связи угловых моментов и разных приближений, используемых для расчетов орбиталей. Это делает даже приближенные вычисления весьма трудоемкими и не позволяет полагаться на самые простые одноэлектронные методы описания ионизации, такие как приближение сильного поля (strong-field approximation, SFA). Современные методы спектроскопии сверхбыстрых процессов, включая RABBITT (Reconstruction of Attosecond Beating By Interference of Two-photon Transitions), могут эффективно применяться только в сопровождении теоретических расчетов, обеспечивающих учет структуры электронных оболочек атома, причем важно, чтобы эти расчеты могли проводиться достаточно быстро и обеспечивали возможность получения не только количественных характеристик спектров, но и качественной картины их формирования. В частности, для интерпретации экспериментальных данных и при разработке новых экспериментов очень важно понимать, каковы относительные вклады разных каналов ионизации в одно и то же конечное состояние и каким образом они зависят от параметров, определяющих взаимодействие. Диссертация посвящена разработке именно таких методов, базирующихся на модельных аналитических расчетах матричных элементов амплитуд перехода, на основе которых численно определялись спектрально-угловые и поляризационные характеристики фотоэлектронов. Таким образом, актуальность темы исследования не вызывает сомнений и становится особенно очевидной, если учесть, что выполненные в работе расчеты уже использовались для анализа экспериментальных данных.

Диссертационная работа состоит из списка терминов, обозначений и сокращений, введения, четырех глав, заключения и списка литературы, включающего 147 наименований.

Во введении сформулированы цели работы, определен объект исследования, обоснованы актуальность, новизна и практическая значимость работы, перечислены выносимые на защиту положения, приведены сведения об апробации работы и публикациях, обозначен личный вклад автора в получение опубликованных результатов.

Первая глава посвящена краткому описанию современного состояния исследований ионизации атомов в бихроматических и многочастотных полях.

Описываются принципы когерентного контроля ионизации. Дан краткий обзор методов аттосекундной метрологии, включая схему RABBITT, важную для понимания результатов, представленных в последующих главах.

Во второй главе приведено описание теоретических методов атомной физики, лежащих в основе исследования. Приведены общие уравнения для амплитуд перехода под действием внешнего поля. Введен формализм стационарной и нестационарной теории возмущений. Показано, каким образом производится переход к описанию в терминах матрицы плотности. Введены статистические тензоры электрона и фотонов. Приведены формулы для вычисления наблюдаемых в схемах с различными типами связи. Данная глава не содержит новых результатов, но приведенная в ней сводка методов и уравнений важна для понимания основного материала.

Глава третья также посвящена методологии, но уже не на уровне общих формул для амплитуд и компонент матрицы плотности, а в контексте расчета матричных элементов. Дан краткий обзор метода Харри-Фока и его многоконфигурационного аналога. Приведен алгоритм расчета атомных орбиталей. В качестве тестовой задачи рассчитаны сечения фотоионизации $2p$ оболочки неона в различных калибровках оператора взаимодействия. Дано описание метода R -матрицы и его приложения к расчету амплитуд перехода из связанных состояний в континуум. Описан метод устранения расходимостей, возникающих при расчете амплитуд перехода в континууме. Рассчитаны парциальные сечения двухмоторной ионизации (в s - и d -волну) атомов водорода и гелия.

Четвертая глава диссертации является главной. В ней изложены основные результаты, полученные автором. Исследована ионизация неона в бихроматическом поле $\omega + 2\omega$. Найдено угловое распределение фотоэлектронов. Исследована степень его асимметрии в зависимости от характеристик излучения второй гармоники. Полученные результаты использованы для анализа экспериментальных данных по ионизации неона в бихроматическом поле, состоящем из линейно поляризованных вдоль одной оси компонент (эксперимент выполнен на ЛСЭ FERMI в Триесте, результаты опубликованы в 2022г. с участием соискателя). Исследованы эффекты поляризации электронов при ионизации в бихроматическом поле. Та же задача об ионизации в поле $\omega + 2\omega$ была рассмотрена в одноэлектронном приближении для гелия. Наконец, были рассчитаны спектры фотоэлектронов в схеме RABBITT, где ионизация происходит в поле составленном из основной частоты и нескольких высоких гармоник. Проанализированы вклады отдельных путей ионизации в итоговый сигнал. Рассчитаны угловые распределения фотоэлектронов в нескольких сателлитах для различных значений фаз поля накачки.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертации.

Представленные в диссертационной работе результаты являются новыми. К наиболее важным я бы отнес следующие:

1. Развита модель ионизации сложных атомов в многокомпонентном электромагнитном поле, описывающая процесс в терминах статистических тензоров. Модель является в вычислительном отношении существенно более «дешевой», чем точное численное решение уравнения Шредингера и позволяет не только производить расчеты распределений и поляризационных состояний фотоэлектронов с высокой количественной точностью, но и качественно анализировать вклады различных путей фотоионизации в итоговый сигнал.
2. Детально проанализирована ионизация атомов неона бихроматическим полем. Полученные результаты демонстрируют хорошее согласие с экспериментальными данными и предоставляют эффективный инструментарий для разработки экспериментов такого типа и анализа их результатов.
3. Для процесса ионизации в полихроматическом поле, состоящем из основной и нескольких высоких гармоник, была продемонстрирована существенная роль переходов через дискретные состояния. Этот результат важен в качественном отношении – он демонстрирует неизбежность выхода за рамки приближения сильного поля при рассмотрении ионизационных схем типа RABBITT.

Разработанные методы расчета спектров фотоэлектронов, образующихся при ионизации атомов в полихроматических полях, могут быть использованы при анализе экспериментальных данных и для разработки новых экспериментов по когерентному контролю и аттосекундной спектроскопии при помощи лазеров на свободных электронах или источников высоких гармоник на основе газовых сред. В частности, полученные результаты могут быть востребованы в таких исследовательских центрах как Институт квантовой оптики им. М. Планка (Гархинг, Германия), институт нелинейной оптики и спектроскопии (Берлин, Германия), Extreme Light Infrastructure (Чехия, Венгрия), Институт общей физики РАН, Физический институт РАН, Московский государственный университет, Институт прикладной физики РАН и многих других российских и зарубежных НИИ, вузах и лабораториях, проводящих исследования в области нелинейной атомной оптики, спектроскопии и аттосекундной метрологии.

Результаты диссертационной работы прошли широкую апробацию в научном сообществе. Соискателем было представлено около 20 докладов на российских и международных научных конференциях и семинарах; в рецензируемых журналах опубликовано 11 работ по теме диссертации, в том числе 4 работы в журналах *Physical Review*. Насколько можно судить по тексту диссертации, представленные результаты получены автором лично. Автореферат полно и достоверно передает содержание диссертации.

При изучении работы у меня возникли вопросы и замечания, сформулированные ниже:

1. В расчетах используется дипольное приближение, что для выбранных параметров полей и атома вполне обосновано. Аргументируя применимость дипольного приближения, автор ссылается на Рис.1.1, почерпнутый из работы Н. Reiss [42]. В тексте рисунок комментируется очень кратко, однако из рассмотрения самого рисунка ясно, что иллюстрируемые им утверждения не могут быть верными (то же относится и собственно к работе [42]). Действительно, из рисунка следует, что дипольное приближение нарушается в низкочастотном пределе при довольно слабых полях, а постоянном поле неприменимо вовсе. Конечно, это не так.
2. Результаты Главы 3 для сечений фотоионизации и величин приведенных дипольных матричных элементов (Рис.3.2 и 3.3 соответственно) получены в двух калибровках – длины и скорости. Из показанных на рисунках кривых видно, что рассчитанные величины калибровочно неинвариантны. Само по себе отсутствие калибровочной инвариантности, к сожалению, является довольно типичным для приближенных моделей нелинейной атомной оптики. Иногда удается обосновать, какая из калибровок и по каким причинам лучше работает в том или ином случае. Из Рис.3.2(а) можно сделать вывод, что лучше работает калибровка длины. Параметр анизотропии и фазовые сдвиги (Рис.3.2 (б,д)) практически калибровочно инвариантны. Далее, результаты, показанные на Рис.4.5 Главы 4 демонстрируют лучшее согласие с экспериментом то калибровки длины (с), то для калибровки скорости (d). Создается впечатление, что для рассматриваемого метода расчета невозможно указать более предпочтительную калибровку. Так ли это?
3. Текст диссертации написан довольно небрежно. Встречается рассогласование падежей, опечатки, в том числе такие, которые могут привести к неверному пониманию. Пример: утверждение на стр.17 о том, что рассматриваемый в работе режим взаимодействия отвечает случаю $\gamma \ll 1$; на самом деле – наоборот. Некоторые обозначения в формулах не расшифрованы. Иногда конструкция предложений настолько неудачна, что не позволяет сходу понять смысл написанного. Например, на стр.18 встречаем следующую фразу: «Такое внимание к процессу $\omega + 2\omega$ в сильном поле связано с увеличением мощности доступных лазерных источников, и множеству практических применений, о которых было упомянуто выше, хотя продолжают исследования и в рамках теории возмущений».

Перечисленные замечания и недостатки не снижают общей положительной оценки работы, ее научной значимости и новизны.

Считаю, что диссертационная работа «Моделирование нелинейных и

сверхбыстрых ионизационных процессов в атомах в мягком рентгеновском и экстремальном ультрафиолетовом диапазоне» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует специальности 1.3.6. «Оптика» (по физико-математическим наукам), а также критериям, определённым пп. 2.1–2.5 «Положения о присуждении учёных степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», предъявляемым к кандидатским диссертациям, и оформлена согласно приложениям № 8 и 9 «Положения о совете по защите диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, на соискание учёной степени доктора наук Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова», а её автор — Попова Мария Михайловна — заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6. Оптика.

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук,
заведующий кафедрой теоретической ядерной физики
Института лазерных и плазменных технологий
Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ»

_____ Попруженко Сергей Васильевич

"25" сентября 2024 г.

Специальность, по которой официальным оппонентом защищена

докторская диссертация:

01.04.02 — «Теоретическая физика» (по физико-математическим наукам)

Адрес места работы: 115409, г. Москва, Каширское шоссе, д. 31

Телефон: +7 (495)788-56-99 (доб. 93-76)

E-mail: svpopruzhenko@mephi.ru

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

Телефоны: +7 (495) 788-56-99; +7 (499) 324-77-77; e-mail: info@mephi.ru

<https://www.mephi.ru>

Подпись Попруженко Сергея Васильевича ЗАВЕРЯЮ: