

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ**

Федерального государственного бюджетного учреждения

Института общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук

по диссертации Харина Василия Юрьевича

«Взаимодействие интенсивных ультракоротких низкочастотных лазерных импульсов с двухатомными гетероядерными молекулами»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика

Диссертация В.Ю. Харина посвящена теоретическому исследованию влияния сильного лазерного поля на колебательно-вращательные степени свободы гетероядерных молекул. Исследуются режимы диссоциации и стабилизации молекул, а также дипольный отклик на воздействие сильного поля. Несомненно, что тема диссертации актуальна как в плане общей многогранной проблематики о взаимодействии излучения с веществом, так и в плане описания конкретных новых нетривиальных нелинейных эффектов и закономерностей поведения молекул в сильных полях.

В диссертации рассматриваются только двухатомные гетероядерные молекулы и сравнительно низкочастотное лазерное поле. Низкочастотность поля подразумевает, что его частота значительно меньше, чем деленная на константу Планка разность энергий основного и первого возбужденного электронных термов молекулы. Это приближение позволяет автору ограничиться рассмотрением переходов молекулы только в рамках основного электронного терма, и рассматривать влияние поля только на колебательную и вращательную степени свободы молекулы. Основным методом решения таких задач, использованный в диссертации – это численное решение уравнения Шредингера для молекулы во внешнем лазерном поле в рамках указанных приближений. Численные результаты используются для детального качественного обсуждения свойств молекулы в лазерном поле.

Диссертация состоит из Введения, четырех глав и Заключения. В первой главе диссертации дан достаточно полный и содержательный обзор литературы по тематике работы.

Вторая глава является наиболее значимой и содержательной, и она посвящена исследованию и описанию явления интерференционной стабилизации молекул по отношению к фотодиссоциации с возбужденных колебательных уровней. Само по себе явление интерференционной стабилизации было описано теоретически достаточно давно, неоднократно наблюдалось экспериментально и вплоть до настоящего времени является предметом достаточно широких и активных обсуждений в литературе. Но в основном все эти исследования относились к процессам ионизации атомов в сильном поле и стабилизации атомов по отношению к ионизации. Перенесение идей об интерференционной стабилизации на случай



молекул и их диссоциации сильным лазерным полем было осуществлено впервые в работах В.Ю. Харина (и соавторов). Обнаружение этого эффекта в теоретических расчетах и его детальный анализ – это новый и, несомненно, значимый результат, пока еще ожидающий своего экспериментального подтверждения. Найдено, что стабилизация проявляется в замедлении скорости роста вероятности диссоциации в зависимости от интенсивности поля по сравнению с результатами, получаемыми в низшем порядке теории возмущений (рис. 17, 18). Более того, в одномерной модели молекулы (без вращений), начиная с некоторого порогового значения интенсивности, вероятность диссоциации становится убывающей функцией интенсивности (рис. 13). Помимо этого, автором обнаружены и обсуждаются также и качественные различия между интерференционной стабилизацией в атомах и в молекулах. В атомах интерференционная стабилизация имеет место на ридберговских уровнях и обусловлена переходами рамановского типа “ридберговский уровень – континуум - другой ридберговский уровень” (переходы  $\Lambda$ -типа). Стабилизация наступает тогда, когда эти переходы становятся достаточно эффективными, обеспечивают перезаселение ридберговских уровней и деструктивную интерференцию переходов с этих уровней в континуум. В случае молекул, первоначально возбужденных на достаточно высокие колебательные уровни, переходы  $\Lambda$ -типа могут сопровождаться не менее эффективными резонансными переходами рамановского типа, но через колебательные уровни меньшей энергии (переходы  $V$ -типа). Показано, что учет таких переходов существенно влияет, например, на частотную зависимость вероятности диссоциации молекулы (рис. 7). Показано также, что резонансное взаимодействие первоначально заселенных колебательных уровней и уровней меньшей энергии проявляется не только в уменьшении скорости диссоциации молекулы, но и в существенном перезаселении колебательных уровней (рис. 12, 16 и 22). Показано, при учете вращений (в трехмерной модели молекулы) процесс диссоциации и стабилизации может сопровождаться эффективным перезаселением вращательных состояний молекулы (рис. 22). На основе такого анализа сделан интересный вывод о том, что в условиях интерференционной стабилизации после окончания лазерного импульса продукты диссоциации оказываются сконцентрированными в окрестности направления поляризации поля, в то время как угловой волновой пакет недиссоциировавших молекул оказывается ориентированным в плоскости, перпендикулярной поляризации (рис. 23 и текст перед ним на стр. 59). Наконец, также в главе 2 выполнены расчеты, соответствующие часто используемой в экспериментах по pump-probe схеме, в которой используются два импульса поля: сильный (накачка) и слабый, пробный, задержанный относительно накачки на некоторое изменяемое время  $\tau$ . Применительно к рассматриваемой задаче результат, представленный на рис. 27, показывает, что вероятность диссоциации пробным импульсом характеризуется совокупностью разномасштабных осцилляций. Самые медленные осцилляции хорошо выражены и показывают, что в зависимости от времени задержки вероятность диссоциации имеет максимумы и минимумы, соответствующие режимам максимально эффективной и неэффективной диссоциации, что соответствует слабо выраженной и максимальной стабилизации молекулы. Этот эффект интерпретируется как результат перезаселения вращательных состояний и образования угловых волновых пакетов, в



наибольшей мере способствующих и, наоборот, - препятствующих диссоциации.

В третьей главе диссертации рассматривается процесс диссоциации молекул в сильном поле, имеющем вид короткого однополярного импульса, аппроксимируемого дельта-функцией. В такой постановке задача решается с помощью хорошо известного метода встряски. Получены аналитические выражения для возникающих в результате встряски вероятностей заселения вращательных уровней молекулы, просуммированных по колебательным состояниям (рис. 31). Найдено, что результат существенно отличается от того, который имеет место в модели жесткого ротатора, что указывает на существенную роль вращений для перестройки в результате встряски колебательных состояний молекулы.

Наконец четвертая глава диссертации посвящена исследованию дипольного отклика молекулы на сильное лазерное поле, т.е. вычислению среднего дипольного момента молекулы в поле. В расчетах предполагается, что молекула изначально возбуждена в состоянии, являющееся когерентной суперпозицией нескольких высоких колебательных уровней. Основным результатом является спектр отклика, показанный на рис. 37 и 41. Особенность спектра состоит в том, что помимо основного пика на частоте лазерного поля спектр содержит также серию хорошо выраженных пиков в области значительно меньших частот. Этот факт интерпретируется автором как указание на возможность использования колебательно-возбужденных молекул в сильном лазерном поле для генерации терагерцового излучения, что может быть важно в практическом плане.

Таковы основные результаты, полученные в диссертации. Результаты многочисленны, являются новыми, они вполне достоверны и физически интересны. Диссертация в целом хорошо написана, хотя и есть ряд замечаний, которые хотелось бы отметить.

По-видимому, именно в силу многочисленности результатов и по необходимости ограниченного объема работы, в ряде случаев явно ощущается недостаток более детального обсуждения. Так, например, при обсуждении временной зависимости диссоциации молекулы на рис. 6 говорится, что на этом рисунке “виден целый набор частот, и максимальная из обнаруженных частот – частота второй гармоники лазерного излучения”. Во-первых, довольно трудно прямо на рисунке зависящей от времени непростой функции увидеть весь набор характеризующих ее частот. А во-вторых, как может вероятность диссоциации изменяться с частотой второй гармоники лазерного поля? Это, как минимум, заслуживает объяснения.

Далее, в уравнении Шредингера (4) для колебательно-вращательного движения молекулы в лазерном поле принято, что дипольный момент молекулы есть линейная функция межъядерного расстояния  $R = |\vec{R}_2 - \vec{R}_1|$ , что, строго говоря, не верно. Известно, что линейной зависимости нет ни при малых, ни при больших межъядерных расстояниях. Верно только, что вблизи равновесного расстояния  $R_0$  дипольный момент можно аппроксимировать константой плюс линейная функция отклонения межъядерного расстояния от равновесного,  $R - R_0$ . Но и в таком виде линейная аппроксимация может нарушаться на расстояниях  $R - R_0$  порядка самого равновесного межъядерного расстояния. Для высоких колебательных уровней молекулы характерные расстояния  $R - R_0$  могут быть сравнимы с  $R_0$ , что следовало бы обсудить в тексте



диссертации и привести соответствующие ограничения на выбор колебательных уровней.

Известно, что в дипольном приближении есть два вида записи гамильтониана поля и атомно-молекулярных систем, часто называемые калибровкой длины и калибровкой скорости, или, соответственно, калибровками  $dE$  и  $pA$ . Известно также, что в точных расчетах эти две калибровки эквивалентны, если значения векторного потенциала поля до прихода импульса и после окончания импульса одинаковы. В приближенных вычислениях результаты, полученные в этих двух разных калибровках, могут отличаться друг от друга, и тогда возникает вопрос, какой из этих результатов более правильный. В диссертации используется калибровка  $dE$ , и не обсуждается вопрос о том, что будет при записи гамильтониана в калибровке  $pA$ . Вообще-то такое обсуждение было бы желательно, в особенности в задаче о взаимодействии молекулы с однополярным импульсом поля.

Потенциальная энергия межъядерного движения в основном электронном терме молекулы моделируется в работе потенциалом Морзе. Такая модель годится только для молекул, диссоциирующих на нейтральные атомы; в молекулах, диссоциирующих на ионы, потенциал имеет кулоновскую асимптотику на больших расстояниях. Это следовало бы отметить в тексте диссертации и дать хотя бы качественный прогноз насчет того, как могут измениться результаты в случае дальнедействующего потенциала межъядерного движения.

Приведенные замечания не меняют приведенной выше общей высокой оценки диссертации. Автором получен ряд важных новых результатов, открывающих существенный раздел в области взаимодействия молекул с сильным лазерным полем. Совокупность полученных результатов свидетельствует о высокой квалификации автора как физика-теоретика. Полученные им результаты опубликованы. Они докладывались на ряде международных конференций и были приняты участниками с большим интересом. Диссертация была заслушана на семинаре по многофотонным процессам ИОФРАН. Список работ автора и диссертация в целом удовлетворяют всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, В.Ю. Харин, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика. Автореферат диссертации правильно и полно отражает ее содержание. Результаты, полученные в диссертации, могут найти применение в ИОФРАН, в ФИАН, МИФИ, ИПФ РАН, МФТИ и в других научных организациях.

Заключение составил Макаров Вячеслав Петрович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Теоретический отдел ИОФ РАН, ведущий научный сотрудник.

