ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертационную работу Червинской Анастасии Сергеевны
"Спектроскопические характеристики и динамика процессов в ридберговских атомах и полярных молекулах",
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3 - Теоретическая физика

Актуальность темы и соответствие специальности

Атомы и молекулы в высоковозбужденных (ридберговских) состояниях являются предметом интенсивных теоретических и экспериментальных исследований в настоящее время. В таких атомах и молекулах один из внешних электронов находится в состоянии со значением главного квантового числа n>>1. Электрон слабо связан с положительно заряженным остовом и находится в среднем далеко от него. Поэтому ридберговские состояния являются водородоподобными, и их параметры можно с высокой точностью рассчитывать разнообразными теоретическими методами, чему и посвящена диссертационная работа А.С. Червинской. Это свидетельствует о соответствии темы диссертации выбранной специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Актуальность изучения ридберговских атомов и молекул обусловлена как возможностью проверки различных теоретических моделей путем сравнения с экспериментами, так и возможными применениями в области квантовой информатики (двухкубитовые квантовые операции, квантовые симуляции) и сенсорики (сенсоры электромагнитных полей).

Исследования ридберговских состояний также весьма актуальны для астрофизических наблюдений. Атомы и молекулы в разреженной и сравнительно холодной межзвездной среде могут давать характерные спектральные линии в инфракрасной и микроволновой областях спектра, соответствующих переходам между ридберговскими состояниями. На основе этой информации молекулярная астрофизика изучает образование, разрушение и возбуждение атомов и молекул в астрономических средах и их влияние на структуру, динамику и эволюцию астрономических объектов. Наиболее актуальными для астрофизики расчетами являются вероятности переходов между ридберговскими состояниями для различных атомов, ионов и молекул, мультиполные моменты переходов, поляризуемости ридберговских уровней, а также сечения столкновений, рекомбинации и фотодиссоциации.

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

Обоснованность результатов диссертации А.С. Червинской обусловлена проведенным сопоставлением результатов расчетов, полученных различными методами. Результаты расчета спектроскопических характеристик молекулы NaHe, полученные разработанным в диссертации методом, сравнены с расчетами, приведенными в других работах, и получено хорошее согласие. Временная динамика заселенности ридберговских состояний, полученная аналитическими методами, сопоставлена с численным решением кинетических уравнений. Таким образом, степень обоснованности достаточна для кандидатской диссертации.

Научная новизна, теоретическая и практическая значимость диссертационной работы

Научная новизна и теоретическая значимость диссертации А.С. Червинской заключаются в разработке и усовершенствовании методов теоретического расчета спектроскопических характеристик ридберговских состояний атомов и молекул. Для молекул было впервые показано, что вклад дипольного момента в волновую функцию системы учитывается наиболее точным образом при выборе начала отсчета в геометрическом центре совокупности точечных зарядов. Также впервые показано, что вклад квадрупольного момента молекулярного остова в угловую часть волновой функции существенен даже при увеличении расстояния между ридберговским электроном и остовом. Разработан метод модельного потенциала для эксимерных молекул. На его основе выполнен расчет спектроскопических свойств ряда возбужденных электронных состояний молекулы NaHe, причем 12 из этих состояний изучались впервые. Также впервые с использованием диффузионного приближения выполнен анализ и расчет скоростей стохастической ионизации и перераспределения заселенностей ридберговских состояний атомов Na и H под действием излучения с непрерывным частотным спектром.

Практическая значимость диссертационной работы заключается в возможности анализа спектров газов ридберговских атомов и молекул, а также спектров межзвездных сред на основе построенных новых теоретических моделей. Эти модели позволяют рассчитывать как длины волн различных спектральных линий, так и их формы и ширины, что позволяет делать предположения о составе и внутренних процессах, происходящих в таких средах.

Содержание и структура диссертации

Диссертация состоит из Введения, Обзора литературы, трех Глав, Заключения и Списка литературы. Во **Введении** сформулированы актуальность исследований, цели работы, практическая новизна и значимость, и защищаемые положения. В **Обзоре литературы** дан исчерпывающий обзор теоретических методов расчета спектроскопических характеристик ридберговских состояний атомов и молекул.

В **Главе 1** описано диполь-кулоновское приближение и его использование для расчета сил осцилляторов эксимерной молекулы NaHe. Определено оптимальное положения начала отсчета для линейного остова. Проведен анализ волновых функций и сил осцилляторов, полученных в диполь-кулоновском приближении с точным решением (для двухцентрового остова) и с численным расчетом (для трехцентрового остова) в зависимости от положения начала отсчета. Определено оптимальное положение начала отсчета для системы из N точечных зарядов. Исследован вклад квадрупольного момента в волновую функцию системы, произведен асимптотический учет вклада квадрупольного слагаемого в угловую часть волновой функции при $r \to \infty$.

В **Главе 2** построен модельный потенциал для эксимерной молекулы NaHe. С этим потенциалом численно решено уравнение Шредингера методом конечных элементов. Изучены спектроскопические характеристики первых 38 состояний молекулы NaHe. Построены кривые потенциальной энергии и распределение электронной плотности. Подтверждено, что кривые потенциальной энергии высоких ридберговских состояний имеют несколько ям и барьеров на больших

межъядерных расстояниях, обусловленных радиальными колебаниями электронной плотности ридберговских состояний атома натрия.

В **Главе 3** представлен формализм диффузионного приближения с использованием уравнения Фоккера-Планка для описания перераспределения населенностей ридберговских состояний под действием излучения с непрерывным спектром. Сопоставлено диффузионное приближение с численным решением кинетических уравнений на примере атомов Na и H. Получены аналитические оценки для населенностей состояний, скорости ионизации и минимальной спектральной плотности излучения, необходимой для значительной вероятности ионизации. Произведен анализ перераспределения населенностей в пространстве квантовых чисел n и l для атома H. Получены аналитические выражения для средней линии диффузии населенностей и для зависимости населенностей от времени.

В **Заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы и области их возможного применения.

Список замечаний по диссертации

1. Защищаемые положения 2-5 на стр. 9 сформулированы как перечисление выполненных работ без раскрытия сути их результатов. Их следовало бы сформулировать так же, как защищаемое положение 1 – в виде законченной фразы, указывающей на то, что именно открыл или обнаружил соискатель. При этом обоснованность самих результатов положений 2-5, полученных в диссертации, сомнений не вызывает.
2. Внизу стр. 62 не дано обоснование выбора конкретных минимальных и максимальных частот прямоугольного спектра для моделирования случайных блужданий в атоме Na. Соответствуют ли эти значения какой-либо средней температуре излучения, важной для изучения? На Рис. 3.10 (стр. 82) приводятся результаты аналогичных расчетов для излучения черного тела с температурами 600 и 1000 К. Следовало бы объяснить, почему выбраны именно эти температуры, а, например, не комнатная температура 300 К, при которой обычно проводятся эксперименты?
3. В свете предыдущего замечания, представляло бы интерес сопоставление приведенных в Главе 3 результатов расчетов перераспределения населенностей в атоме Na под действием излучения черного тела с результатами имеющихся экспериментов, например, из работы [Beterov et al., Ionization of sodium and rubidium nS, nP, and nD Rydberg atoms by blackbody radiation, Physical Review A, 2007, v. 75, p. 052720].

Указанные замечания не снижают общей положительной оценки диссертационной работы А.С. Червинской.

Заключение оппонента о соответствии работы требованиям ВАК

Оценивая диссертационную работу А.С. Червинской в целом, следует отметить актуальность поставленных задач, большой объем проведенных теоретических исследований, получение как численных, так и аналитических

результатов при решении довольно сложных задач нахождения спектроскопических характеристик молекулы NaHe и временной динамики заселенностей ридберговских состояний в поле внешнего широкополосного излучения. Высокий научный уровень полученных результатов и квалификация А.С. Червинской подтверждаются публикацией 5 научных статей по теме диссертационной работы в изданиях из списка ВАК и несколькими докладами на международных конференциях.

Тема исследования диссертационной работы А.С. Червинской полностью отвечает специальности 1.3.3. - Теоретическая физика. Автореферат правильно отражает содержание диссертации. Диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям Положения о порядке присуждения научных степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор – Червинская Анастасия Сергеевна – заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3 - Теоретическая физика.

Официальный оппонент:
Член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, лаборатория нелинейных резонансных процессов и лазерной диагностики, заведующий — Рябцев Игорь Ильич

03.11.2022

Подпись Рябцева Игоря Ильича заверяю:
Ученый секретарь Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, кандидат физико-математических наук — С. А. Аржанникова

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук
Почтовый адрес: 630090, Россия, Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, 13
тел. (383) 333-24-08
факс (383) 333-27-71
E-mail: ryabtsev@isp.nsc.ru