

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Федерального исследовательского центра



/ Гарнов С.В./

22 «Ноября 2022 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

**Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального
исследовательского центра «Институт общей физики им. А.М. Прохорова
Российской академии наук» на диссертационную работу Червинской Анастасии
Сергеевны «Спектроскопические характеристики и динамика процессов в
ридберговских атомах и полярных молекулах», представленной на соискание
ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности**

1.3.3. Теоретическая физика

Диссертационная работа А.С. Червинской «Спектроскопические характеристики и динамика процессов в ридберговских атомах и полярных молекулах» посвящена разработке новых теоретических методов расчета спектроскопических характеристик ридберговских состояний атомных и молекулярных систем и использованию этих методов для исследования динамики ридберговских состояний в поле излучения с непрерывным спектром.

Актуальность диссертационной работы. Тематика диссертационной работы относится к широкому направлению исследований, развивающемуся в рамках молекулярной оптики и спектроскопии и посвященному изучению свойств ридберговских состояний, переходов между ними, динамики этих состояний во внешнем поле и спектров излучения ридберговских систем. Одним из главных потребителей знаний о ридберговских состояниях атомных и молекулярных систем является астрофизика, для которой интерпретация информации, содержащейся в

спектрах космических источников излучения является основным, а порой и единственным методом изучения физических свойств этих источников.

Знание электронных свойств ридберговских атомов и молекул необходимо в широком круге задач, связанных с физикой холодных газов, бозе-конденсации, оптического контроля атомных систем и реализациями квантового компьютера. Спектральные характеристики ридберговских состояний, особенно с большим значением орбитального момента, также служат источником знаний о свойствах связывающих внешний электрон ионов, включая их электрические моменты и поляризуемость.

Несмотря на то, что исследования ридберговских систем развиваются давно и очень интенсивно, в этой области физики все еще остается немало открытых и к тому же весьма актуальных вопросов. *Ab initio* расчеты волновых функций ридберговских состояний очень сложны, особенно в случае молекул. Поэтому приближенные методы расчета сохраняют свою значимость, а повышение их точности представляется исключительно актуальной задачей в силу того, что точность спектроскопических измерений очень высока. Метод квантового дефекта, широко используемый в атомной физике для расчета характеристик возбужденных состояний, оказывается недостаточно точным для систем, остав которых обладает несулевым дипольным или квадрупольным моментом. Модернизация этого метода, направленная на учет дипольного взаимодействия, стала возможной благодаря построению аналитических решений одноэлектронного уравнения Шредингера для системы с кулоновским и дипольным взаимодействием.

Диссертационная работа посвящена уточнению диполь-кулоновского приближения, позволяющему существенно повысить точность спектроскопических расчетов, а также учету вклада следующего, квадрупольного слагаемого в спектральные характеристики ридберговских состояний. Представлены также расчеты спектров эксимерных молекул и исследование динамики заселенности ридберговских состояний системы, находящейся во внешнем электромагнитном поле с непрерывным спектром. Актуальность этих расчетов связана с возможностью реализации процессов перезаселения ридберговских уровней в разреженных атмосферах космических объектов.

Структура диссертационной работы. Диссертация А.С. Червинской состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы из 140 наименований. Полный объем текста составляет 108 страниц, включая 24 рисунка и 9 таблиц.

Во **Введении** приведено краткое описание современного состояния области исследований, дан обзор литературы, обоснована актуальность темы диссертации и сформулирована цель работы, поставлены задачи, изложены научная новизна и практическая значимость, приведены основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена применению диполь-кулоновского приближения для расчета сил осцилляторов в молекуле NaHe. Кратко описаны основные положения метода квантового дефекта и диполь-кулоновского приближения. Подробно исследован вопрос о выборе начала координат, в которых вычисляется дипольный и высшие моменты. В качестве критерия, используемого для выбора положения начала координат используется максимизация скорости сходимости мультипольного разложения для потенциала. Рассмотрены примеры молекул с двух- и трехцентровым остовом, показывающие, что предложенный метод выбора начала координат повышает точность диполь-кулоновского приближения. Даны оценки вклада квадрупольного момента остова в угловую часть волновой функции ридберговского электрона. Показано, что этот вклад не исчезает полностью с ростом квантовых чисел ридберговского состояния.

Вторая глава посвящена построению модельного гамильтонiana для той же молекулы NaHe и использовании этого гамильтонiana в численном решении уравнения Шредингера, позволяющие определить спектроскопические характеристики одночастичных возбужденных состояний. Построены кривые потенциальной энергии такой системы и найдено распределение электронной плотности. Выявлен многоядерный характер кривых потенциальной энергии для ряда возбужденных состояний. Показано, что для тех состояний, характеристики которых уже были известны в литературе, результаты расчетов демонстрируют хорошее согласие с ранее установленными данными, что косвенно подтверждает высокую количественную точность метода, предложенного в диссертации.

В третьей главе исследован эффект перераспределения электронов по ридберговским состояниям под действием излучения с непрерывным спектром. Сформулирована система кинетических уравнений для заселенностей связанных состояний. Выполнено моделирование движения электрона по ридберговским уровням методом Монте–Карло. Обнаруженные длительные блуждания, процесс которых удобно описывать при помощи уравнения Фоккера–Планка. Такое описание реализовано для случая атомов натрия и водорода. Получены приближенные численные выражения, неплохо воспроизводящие результаты расчетов.

В **Заключении** сформулированы основные результаты, наиболее важными из которых являются следующие:

1. Решена задача об оптимальном выборе начала координат при использовании диполь–кулоновского приближения для расчета спектроскопических характеристик молекул с дипольным остовом.
2. Найден вклад квадрупольного взаимодействия в угловую структуру волновой функции ридберговского электрона.
3. Разработан модельный подход к расчету спектров эксимерных молекул. Подход апробирован на примере молекулы NaHe.
4. В диффузионном приближении исследована динамика перезаселения ридберговских состояний в пространстве квантовых чисел (n, l) под действием излучения с непрерывным спектром. Полученные результаты использованы для описания диффузионной динамики населения атомов натрия.

Научная, теоретическая и практическая значимость работы. Полученные результаты могут быть использованы для уточненных расчетов спектроскопических и динамических характеристик ридберговских состояний атомов и молекул, а также при интерпретации данных астрономических наблюдений спектров звезд, туманностей и экзопланет. Последнее особенно актуально в свете огромного интереса к исследованию экзопланет, который нарастет в течение последнего десятилетия. Результаты диссертационной работы могут найти применение в расчетно–теоретических исследованиях широкого круга

специалистов, занимающихся спектроскопией ридберговских систем и спектральным анализом в астрофизике в Физическом институте РАН им. П.Н. Лебедева, Институте спектроскопии РАН, Институте космических исследований РАН, Государственном астрономическом институте им. П.К. Штернберга МГУ и других научно-исследовательских и образовательных организациях. Высокая степень обоснованности и достоверности приведённых в диссертации результатов связана с тем, что диссертантом использованы апробированные теоретические методы, подтвержденные численным моделированием. Представленные в диссертационной работе результаты опубликованы в виде 5 статей в российских и зарубежных научных журналах из перечня ВАК, индексируемых базами данных Web of Science и Scopus и докладывались и обсуждались на нескольких международных конференциях.

При изучении диссертационной работы возникли следующие вопросы и замечания:

1. В разделе 1.4, посвященном выбору начала координат, оптимизирующему диполь-кулоновское приближение, непонятно утверждение о том, что «точность приближения (1.4) улучшится, если начало отсчета выбрано так, чтобы расстояние b до наиболее удаленного заряда было минимальным». От какой точки этот заряд является наиболее удаленным и почему расстояние b нельзя выбрать сколь угодно малым? Ответы на эти вопросы скорее всего очевидны и подразумеваются известными в изложенном в разделе анализе, но в явном виде найти их не удается. Как изменятся результаты расчета, если, в соответствии с формулой (1.17) выбрать вектор смещения a так, что дипольный момент окажется равным нулю?
2. В разделе 1.5 исследован вклад высших мультиполей на примере квадрупольного момента. Рассмотрен случай, когда потенциал создается кулоновским центром и квадрупольным слагаемым, а дипольного вклада нет (формула (1.59)). Однако, при отличном от нуля заряде системы величина дипольного момента зависит от выбора начала отсчета, как это обсуждалось выше в разделе 1.4. Таким образом, приведенные в разделе 1.5 результаты привязаны к этой специальной системе координат. Верно ли это? Если да, имеет ли смысл

всегда обнулять дипольный момент и строить волновые функции системы, характеризуемой зарядом и квадрупольным моментом?

3. В уравнениях (1.63) и (1.64) присутствуют опечатки: квадрупольное слагаемое в них заменено дипольным. В уравнении (1.65) и далее квадрупольное слагаемое восстановлено. В целом анализ, приведенный в разделе 1.5 не выглядит завершенным. Получена бесконечная система связанных линейных уравнений на коэффициенты разложения угловой части волновой функции при старшей степени r . Эту систему следовало бы проанализировать более подробно, чтобы дать качественное объяснение тому факту, что относительный вклад квадрупольного взаимодействия в угловую структуру волновой функции не уменьшается с ростом расстояния.

4. В разделе 3.3. обсуждается моделирование случайных блужданий методом Монте-Карло. Частота излучения и другие величины, по-видимому, указаны в атомных единицах. Какой интенсивности излучения отвечает использованное значение спектральной плотности $4 \cdot 10^{-14}$? Такое же значение спектральной плотности использовано и в дальнейших разделах этой главы. Насколько вероятной при выбранном значении интенсивности будет двухфотонная ионизация из начального 9s состояния, которая, по-видимому, энергетически разрешена для фотонов из верхней части прямоугольного спектра?

Данные замечания не снижают общей положительной оценки работы и значимости полученных результатов. Диссертационная работа А.С. Червинской выполнена на высоком научном уровне и вносит значительный вклад в развитие теории ридберговских состояний атомных и молекулярных систем.

Диссертационная работа А.С. Червинской представляет самостоятельное и целостное исследование, выполненное на актуальную тему и на высоком профессиональном уровне. Автореферат полно отражает содержание диссертации. Работа отвечает требованиям к диссертациям, представляемым на соискание ученой степени кандидата наук, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г., а ее автор А.С. Червинская заслуживает, за теоретические и расчетные исследования спектроскопических и динамических характеристик ридберговских состояний атомов и молекул

присуждения, присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3 — теоретическая физика.

Диссертационная работа была заслушана 9 ноября 2022г. на семинаре Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук. Отзыв составлен главным научным сотрудником, заведующим теоретическим отделом Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук» Гусейн-Заде Намиком Гусейновичем, ngus@mail.ru; доктором физико-математических наук (научная специальность – 01.04.02 – теоретическая физика).

Отзыв обсужден и утвержден на семинаре ИОФ РАН Протоколом №8 от 9.11.2022 г.

 Гусейн-Заде Н.Г.

"21" ноября 2022 г.

Подпись Гусейн-Заде Н.Г. заверяю,
ВРИО ученого секретаря
д.ф.-м.н.

 Глушкин В.В.

 "21" ноября 2022 г.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр
«Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук»
(ИОФ РАН)
Почтовый адрес: 119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38
Телефон: +7 (499) 503-87-34
e-mail: office@gpi.ru