

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу
Чернова Владислава Евгеньевича
«Высоковозбуждённые электронные состояния в малоатомных
системах с несферической симметрией»,
представленную на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук
по специальности 01.04.05 – «Оптика»

Актуальность темы исследования

Высоковозбужденные электронные состояния атомов и молекул играют важную роль в различных процессах, изучаемых в физике и химии низкотемпературной плазмы, астрофизике, астрохимии, а также в экспериментах с охлажденными атомами и молекулами. В этих приложениях важны такие характеристики электронных состояний, как энергии связи (в том числе со спектроскопической точностью), вероятности электронных переходов, статические и динамические поляризуемости, сечения взаимодействия слабосвязанных атомно-молекулярных систем с фотонами и друг с другом при столкновительных процессах.

Для количественной оценки таких характеристик активно используются методы квантовомеханических расчётов из первых принципов (*ab initio*), применение которых к высоковозбужденным состояниям встречает серьезные трудности и требует значительных вычислительных ресурсов. Поэтому актуальной задачей является использование аналитических и полуаналитических методов, которые позволяют дать качественные оценки и получить простые аналитические зависимости вычисляемых характеристик от параметров задачи.

Для ридберговских состояний атомов таким основным аналитическим методом служит теория квантового дефекта (QDT), которая хорошо

описывает волновые функции высоковозбужденных электронных состояний вдали от атомного остова. При переходе к молекулярным ридберговским состояниям возникают трудности, связанные с несферической симметрией потенциала молекулярного остова, в поле которого движется ридберговский электрон. Эта несферическая симметрия обусловлена мультипольными моментами остова, из которых основную роль (для полярных молекул) играет дипольный момент. Существует класс молекул, которые могут связывать внешний электрон в состояния с весьма малой (порядка десятков мэВ) энергией связи (или, как принято в этой области науки, энергией сродства). Такие слабосвязанные состояния появляются благодаря достаточно большому дипольному моменту «родительской» нейтральной молекулы. При этом вся система называется дипольно-связанным анионом (DBA). Эти системы активно изучаются в физической химии, но применяющиеся для их расчетов *ab initio* методы особенно трудоёмки из-за очень малой энергии сродства внешнего электрона. Поэтому для теоретического описания различных процессов с участием DBA (например, их фоторазрушения или столкновений с другими полярными молекулами) необходимо иметь хотя бы приближённую аналитическую модель. Следует отметить, что эффекты дипольного момента могут проявиться и в атомных анионах. Например, при их взаимодействии с сильным лазерным полем значительно повлиять на фотоотрыв электрона может дипольный момент, наведенный этим полем в атомном остове.

Таким образом, поставленные в диссертации В.Е.Чернова задачи следует признать актуальными для оптики и спектроскопии.

Новизна исследования и научная значимость полученных результатов

Наиболее интересными представленными в диссертационной работе В.Е.Чернова новыми результатами можно считать нижеследующие:

1. В главе 1 проводится пересмотр давно известной одноканальной QDT. Автор впервые выписывает корректное соотношение между фазами рассеяния и квантовыми дефектами как функциями энергии электрона в над- и подпороговой области соответственно. С помощью этого

соотношения всей теории QDT придается единообразный вид для над- и подпороговой областей; при этом переход между формулами для каждой области осуществляется просто аналитическим продолжением (соотношения, представленные ранее в работах U. Fano и сотрудников, содержали принципиально разные выражения для над- и подпороговой областей). Наличие такого перехода в диссертации существенно улучшает внутреннюю логику одноканальной QDT.

2. В той же главе 1 развивается теория диполь-сферических функций, являющихся точным решением задачи об электроны в поле точечного заряда и точечного диполя. Приводятся аналитические аппроксимации для коэффициентов Фурье этих функций, содержащих информацию о влиянии дипольной части потенциала на волновую функцию электрона. Аппарат диполь-сферических функций далее используется в главе 3, где впервые приводится простая аналитическая модель DBA, на основе которой строятся аналитические выражения для сечения фотоотрыва электрона от DBA. Важность этих выражений состоит в том, что они впервые дают теоретическое обоснование наблюдавшейся в эксперименте обратной квадратичной зависимости сечения от частоты фотона. На основе данных выражений в диссертации вычисляется вероятность распада (время жизни) DBA в тепловом поле. Полученные времена жизни хорошо согласуются с экспериментом группы Rice University (США). Для объяснения другого эксперимента этой группы, – аномально больших сечений перезарядки DBA на полярной молекуле, автор впервые строит простую аналитическую модель, предсказывающую слабую (логарифмическую) зависимость сечения от дипольного момента сталкивающихся молекул. Интересным приложением диполь-сферических функций можно считать исследованное в главе 3 влияние наведенного лазерным полем дипольного момента атомного остова на фотоотрыв электрона (т.е. на фотораспад соответствующего атомного аниона).
3. В главе 4 предлагается техника «замещенной» функции Грина в QDT: вклад высоковозбужденных состояний учитывается в рамках

полуаналитической QDT, а низковозбужденные состояния замещаются с помощью расчетов *ab initio* волновых функций или сил осцилляторов. Полезность предложенной техники состоит в том, что её простота и ясный физический дает возможность использовать её для расчётов многофотонных процессов в сложных атомах и некоторых простых молекулах. С помощью предложенной техники в диссертации впервые вычисляются двухфотонные матричные элементы (динамические поляризуемости) для многих атомов (в т.ч. для возбужденных состояний и с учётом тонкой структуры атомных спектров) атомов и некоторых двухатомных молекул.

Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации

Результаты, полученные в диссертации, позволяют проводить широкомасштабные расчеты таких спектроскопических характеристик атомов, молекул и ионов, как силы осцилляторов, сечения фотоионизации (и фотоотрыва), поляризуемости. Такие расчеты могут быть использованы в организациях, занимающихся спектроскопией, физикой и химией низкотемпературной плазмы, физикой атмосферы Земли и других планет: ИСАН (г. Троицк), ИНАСАН (г. Москва), ИПФ (г. Нижний Новгород), МФТИ (г. Долгопрудный), ВГУ (г. Воронеж) и других организациях.

Представленные в диссертации материалы также целесообразно использовать в преподавании учебных курсов в магистратуре по специальности 03.04.02 (Физика).

Замечания

При рассмотрении диссертация В.Е. Чернова возникли следующие замечания:

1. При детальном анализе метода квантового дефекта было бы весьма желательно проанализировать роль эффектов запаздывания и, тем самым, определить диапазон применимости дипольного приближения при описании радиационных переходов.
2. Поскольку метод квантового дефекта дает асимптотически правильные волновые функции вдали от кулоновского центра, то при вычислении матричных элементов операторов точность результатов чувствительна

как к радиальной зависимости операторов, так и к поведению самих волновых функций. Так, если использовать дипольные матричные элементы в форме ускорения, то разумные результаты не могут быть получены, хотя формально для точных волновых функций такое представление вполне законно. При расчете дипольных переходов из низких состояний в высоковозбужденные, даже в представлении длины, также произойдет потеря точности, поскольку интеграл перекрытия будет определяться малыми расстояниями от ядра, где волновая функция в методе квантового дефекта имеет неверную сингулярную асимптотику. Все эти особенности характерны как для атомов, так и для молекул и требуют постоянного контроля. Поэтому, было бы естественным освещением вопросов точности расчетов по методу квантового дефекта в отдельном специальном разделе.

3. Используемое понятие «Одноканальная теория квантового дефекта для уравнения Уиттекера» представляется не очень удачным, поскольку речь идет в действительности об асимптотическом решении уравнения Уиттекера, возмущенного короткодействующим потенциалом.
4. Рисунок 3.4 на стр. 204 не согласуется с вышеприведенной зависимостью $\sigma_m \sim 1/E_b$
5. В диссертации содержится довольно большое количество опечаток. Например, на стр. 59 в формуле Нормана (1.107) пропущен мнимый член в правой части; на стр. 73 во фразе "Хотя $f_q(z)$ и $f_{-q-1}(z)$ линейно независимы при целых q " следует читать «линейно *зависимы*»; на стр. 230 в формуле для Δ надо вместо $\epsilon(R')$ писать $E_b(R')$ и т.д.

Отмеченные выше недостатки не снижают общего положительного впечатления от диссертации В.Е. Чернова «Высоковозбужденные электронные состояния в малоатомных системах с несферической симметрией». Диссертация является законченным научным исследованием на актуальную тему, излагаемые в ней научные результаты обладают научной новизной и являются существенным вкладом в спектроскопию атомов и молекул, а также могут быть использованы в физике и химии низкотемпературной плазмы, астрофизике и астрохимии. Результаты работы

докладывались на международных конференциях и опубликованы в 30 статьях в журналах, входящих в базу данных Web of Science и список ВАК. Автореферат правильно и в полном объеме отражает основное содержание диссертации.

Диссертация «Высоковозбуждённые электронные состояния в малоатомных системах с несферической симметрией» удовлетворяет требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор Чернов Владислав Евгеньевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.05 – "Оптика ".

Профессор кафедры инноватики и строительной физики,
Строительно-технологический институт,
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования «Воронежский государственный
архитектурно-строительный университет»

Доктор физико-
математических наук,
профессор



Головинский Павел Абрамович

Адрес: 394006, Воронеж ул. 20 лет Октября, 84

E-mail: golovinski@bk.ru

Телефон: +7 (960) 1106311

