

## ОТЗЫВ

официального оппонента о диссертации В.Е. Чернова  
«Высоковозбужденные электронные состояния в малоатомных системах с  
несферической симметрией»,  
представленной на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук  
по специальности 01.04.05 – оптика

Диссертация В.Е. Чернова посвящена разработке новых теоретических подходов к описанию квантовой динамики слабосвязанных электронов в атомно-молекулярных системах с несферически-симметричным взаимодействием. Речь идет о спектроскопии высоковозбужденных атомов с наведенным внешним электрическим полем дипольным моментом, высоковозбужденных состояний дипольных молекул, а также о спектральных свойствах связанных состояний отрицательно заряженных молекулярных ионов. Развитый в диссертационной работе теоретический аппарат предназначен для решения широкого круга задач оптики атомов и молекул, включая расчеты их поляризуемостей, задачи астрофизической спектроскопии, атмосферной оптики, физики плазмы и др.

Актуальность представленного исследования обусловлена следующими факторами:

- 1) В современной астрофизике ощущается значительная нехватка спектроскопической информации в инфракрасной области – имеющиеся в настоящее время базы данных неполны и не всегда обеспечивают требуемую точность; в частности, в литературе сравнительно мало представлены результаты расчетов частот линий и сил осцилляторов для переходов между возбужденными электронными состояниями молекул, в том числе малоатомных.
- 2) В последнее время возрос интерес у исследованию свойств ридберговских состояний атомов и молекул в присутствии сильного электрического поля (обычно получаемого при помощи мощных лазеров), в котором осто

атома поляризуется, что существенно влияет на динамику валентного электрона, находящегося в высоковозбужденном состоянии. К эффектам, связанным с формированием долгоживущих возбужденных состояний в сильном лазерном поле, можно отнести ридберговское подавление туннельной ионизации в сверхкоротких лазерных импульсах, ускорение атомов пространственно-неоднородным лазерным полем и др.

- 3) В современных экспериментах по фотоионизации и фотовозбуждению (как одноквантовых – в слабом поле, так и многоквантовых – индуцированных электромагнитной волной высокой интенсивности) наблюдаются эффекты, связанные с поляризацией атомного остова самим электроном или внешнем полем. Особенно существенны такие эффекты для молекул с большим значением поляризуемости, где они приводят к существенной модификации спектрально-угловых распределений фотоэлектронов.
- 4) В настоящее время имеется большой объем расчетных и экспериментальных данных по спектроскопии дипольно-связанных анионов. Теоретические результаты в этой области исследований базируются, в основном, на масштабных численных *ab initio* расчетах, и ощущается потребность в развитии аналитической теории.

В диссертационной работе с использованием теории квантового дефекта развито аналитическое описание различных квантовомеханических процессов с участием слабосвязанных (в том числе, высоковозбужденных) электронов в атомных и молекулярных системах с несферически-симметричным взаимодействием. Разработанная теория используется для количественного расчета характеристик слабосвязанных атомных и молекулярных систем; полученные результаты подробно сравниваются с экспериментальными данными.

Диссертация В.Е. Чернова состоит из введения, 4 глав, заключения, 14 приложений и списка литературы, содержащего 587 наименований. Общий объем диссертации составляет 463стр.

Во введении сформулирована цель диссертационной работы, обоснована актуальность исследования, приведены положения, выносимые на защиту. Перечислены полученные результаты, дано краткое обоснование их достоверности, описание возможностей использования, практической значимости и научной новизны. Подробно описан личный вклад автора в получение результатов.

Первая глава посвящена обзору теоретических и математических методов, которые использовались при получении основных результатов диссертационной работы. Подробно изложена квантовомеханическая задача о движении электрона в нецентральной поле вращающегося молекулярного остова. Приведены основные положения и соотношения теории квантового дефекта, в том числе построена функция Грина с учетом квантового дефекта (QDT-ФГ). Приведены удобные аналитические разложения для QDT-ФГ и сформулирован рецепт устранения ее нефизических полюсов.

Во второй главе с использованием формализма, изложенного в первой, выполнены расчеты матричных элементов первого порядка между ридберговскими состояниями в атомах и молекулах. Представлены результаты расчетов сил осцилляторов для различных атомов, на основе которых выполнен анализ экспериментальных данных по инфракрасным спектрам этих атомов и классифицированы новые, ранее не описанные, атомные переходы в этой области спектра, недавно исследованные на эксперименте. С учетом эффектов дипольного взаимодействия рассчитаны силы осцилляторов молекул NeH и ArH. Показано, что эти величины существенно отличаются от полученных ранее в пренебрежении дипольным моментом атомного остова. Предложена классификация схем связи угловых моментов молекулярного остова и электрона в ридберговских молекулах. Введено подразделение известных пяти случаев Хунда на подслучаи. Рассмотрено приложение развитого формализма для описания эффектов Зеемана и Пашена-Бака для на ридберговских состояниях полярных молекул.

Третья глава посвящена теории слабосвязанных электронных состояний в отрицательных ионах и влиянию на них внешнего электромагнитного поля. Развита электронная модель диполь-связанного аниона, найдены критические значения дипольного момента остова, при которых возникает первое связанное

состояние, получены волновые функции непрерывного спектра и построены состояния рассеяния. С использованием найденных волновых функций построена теория фотодиссоциации диполь-связанных анионов. Вычислено время жизни таких анионов в поле теплового излучения и исследована зависимость этой величины от характеристик аниона и температуры излучения. Выполнено сравнение с имеющимися экспериментальными данными, демонстрирующее удовлетворительное количественное согласие. Исследовано влияние наведенного дипольного момента на вероятность многофотонной фотодиссоциации аниона в поле интенсивной лазерной волны. Развито теоретическое описание эффекта резонансной перезарядки при столкновениях диполь-связанных анионов с нейтральными молекулами.

В четвертой главе выполнены расчеты динамических поляризуемостей атомов и молекул с использованием развитого в первой главе формализма функции Грина в приближении квантового дефекта. Приведены результаты расчетов для более чем 20 атомов. Выполнено сравнение этих результатов с расчетными и экспериментальными данными, имеющимися в литературе, демонстрирующее согласие в пределах нескольких процентов. Приведены также результаты расчетов динамических поляризуемостей нескольких полярных и неполярных молекул.

В заключении кратко перечислены основные результаты, полученные в диссертационной работе. Технические детали и приемы вычислений подробно изложены в приложениях, в которых также приведены примеры расчетов с применением разработанных в диссертации методов.

При изучении диссертационной работы возникли следующие вопросы:

1. В разделе 3.1 построены волновые функции связанных состояний в дипольном потенциале в отсутствие кулоновского поля. Отмечается, что для чисто дипольного потенциала имеет место «падение на центр». Путем регуляризации потенциала на малых расстояниях или ввода самосопряженного расширения оператора Гамильтона, можно получить регулярное решение, определяющее спектр связанных состояний. Возникает вопрос: каков классический аналог полученного решения? Известен ли он?

Как правило, задачи, имеющие точное аналитическое решение в квантовой механике, решаются также и в классической.

2. В разделе 3.4 исследовано влияние наведенного дипольного момента на многоквантовый фотораспад атомных анионов в сильном лазерном поле. Модифицированы формулы для спектрально-угловых распределений фотоэлектронов из работы G.F. Gribakin, M.Yu. Kuchiev, Phys. Rev. A **55**, 3760 (1997). Модификация сводится к тому, что, с учетом дипольного взаимодействия, меняется угловая часть волновой функции начального состояния электрона, что приводит к существенной перестройке импульсного распределения электронов, продемонстрированной на Рис.3.13 – 3.15. Неясно, однако, достаточно ли учесть влияние наведенного диполя на структуру связанного состояния или же необходимо также исправить фазу волковской волны (формула без номера после (3.42), стр.216), как это делается в случае учета кулоновского взаимодействия. Если дипольные поправки к фазе несущественны, каков соответствующий параметр малости?
3. Развита в диссертационной работе техника применима для количественного описания малоатомных систем с отсутствием сферической симметрии. В какой мере ее можно обобщить для описания (возможно, менее точного) высоковозбужденных электронных состояний в сложных молекулах?

Сформулированные выше замечания не снижают общей высокой оценки представленной работы.

Диссертационная работа В.Е. Чернова представляет собой законченное фундаментальное исследование, в котором развита теория квантовых процессов в атомных и молекулярных системах с несферической симметрией и продемонстрированы ее многочисленные приложения к спектроскопии атомов и молекул. Все результаты, выносимые на защиту, являются новыми. Они опубликованы в виде более чем 30 печатных работ в журналах из перечня ВАК РФ, включая такие авторитетные издания, как Physical Review, Journal of Physics B, Astronomy and Astrophysics, Chemical Physics Letters и др. Тематика диссертационной работы соответствует специальности 01.04.05 «Оптика», а

представленный текст диссертационной работы – положению правительства РФ о присуждении ученых степеней. Автореферат полно отражает содержание диссертации.

Считаю, что за разработку аналитической теории малоатомных квантовых систем с несферической симметрией и ее применение к описанию свойств высоковозбужденных и слабосвязанных электронных состояний в атомах и молекулах, а также к описанию дипольно-связанных анионов и эффектов взаимодействия таких систем с электромагнитным излучением В.Е. Чернов заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук.

Официальный оппонент

доктор физ.-мат. наук

11 ноября 2015г.



С.В. Попруженко

Попруженко Сергей Васильевич,  
профессор кафедры теоретической ядерной физики,  
Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ,  
Москва, 115409, Каширское шоссе 31  
тел. +74957885699(9376)  
email: sergey.popruzhenko@gmail.com

Подпись удостоверено  
Заместитель начальника  
документационного обесп  
НИЯУ МИФИ



Handwritten signature: *Сергей Васильевич Попруженко*