

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу
Занозиной Екатерины Михайловны «Ридберговские инфракрасные спектры
атомов металлов, полученные в результате лазерной абляции»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук по специальности 01.04.05 – «Оптика»

Актуальность темы исследования

Теоретическое и экспериментальное исследование инфракрасных спектров низкотемпературной плазмы и получение новых спектроскопических характеристик атомов в ИК области играет важную роль в задачах современной астрофизики и астрохимии. Точная и надежная спектроскопическая информация, такая как длины волн переходов, ширины линий, их интенсивности и силы осцилляторов, полученная в инфракрасной области для максимально возможного набора атомов, необходима для расчёта атмосфер планет и холодных звёзд, без чего невозможна корректная интерпретация данных современных ИК телескопов. На данный момент в литературе и современных базах данных практически не представлены лабораторные измерения ИК спектров атомов металлов в области ниже 1800 см^{-1} . Соответственно, в астрофизических источниках приводится весьма небольшое количество идентифицированных атомных ИК-линий. Этот факт указывает на то, что актуальность задач, поставленных и решенных в диссертации Е. М. Занозиной, сомнений не вызывает.

Теоретическая и практическая значимость

Диссертационная работа Занозиной Е.М. носит теоретический характер. Она посвящена обработке ИК-спектров и идентификации спектральных линий атомарных металлов с использованием большого массива вероятностей переходов, рассчитанных методом квантового дефекта. Работа велась в прямом контакте с экспериментаторами из Института физической химии им. Я. Гейровского Академии наук Чешской Республики, и диссертация фактически представляет собой результат тщательного анализа большого количества экспериментальных спектров: идентификации ранее неизвестных линий в области $800\text{--}6000\text{ см}^{-1}$, определения их спектроскопических характеристик и энергий уровней, отсутствующих в базах данных.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций

Автором на достаточно высоком уровне используются различные методы обоснования полученных результатов, выводов и рекомендаций, изучаются и критически анализируются известные достижения и результаты спектроскопического анализа других авторов. Список использованной литературы содержит 226 наименований, что говорит о хорошем анализе исследуемой тематики. Выводы и результаты, полученные диссертантом, обоснованы и достоверны.

Общая характеристика работы

В диссертации на основе анализа экспериментальных спектров высокого разрешения получены спектральные характеристики (волновые числа, ширины, интенсивности) линий переходов атомов Li, Na, Rb, Mg, Ca, Sr и Zn в инфракрасной области $800\text{--}6000\text{ см}^{-1}$. Из полученных данных извлечено большое количество значений ранее неизвестных энергий уровней атомов вышеуказанных металлов, а также внесены поправки в значения энергетических уровней, уже имеющиеся в базах данных. В работе

приводится большое количество идентифицированных неизвестных ранее линий атомов металлов, на основе которых впервые определяются (либо уточняются ранее известные) значения энергий ридберговских nf -, ng - и nh -состояний атомов металлов для главных квантовых чисел $n=5..8$. В диссертации также проделаны расчеты матричных элементов для большого числа переходов в исследуемых атомах металлов, в которых используются впервые полученные из эксперимента значения энергий. Эти расчёты сделаны с помощью метода квантового дефекта, специально адаптированного для атомов с двумя электронами сверх заполненных оболочек. Результаты, полученные в диссертационной работе, имеют не только теоретическое значение, но и являются актуальными в точки зрения практических приложений.

Во введении обосновывается актуальность темы диссертации, формулируются основные цели, а также описана практическая значимость результатов, представляющих научную новизну.

Первая глава диссертации посвящена большому литературному обзору состояния приложений техники лазерной абляции и методов инфракрасной спектроскопии. Обзор содержит анализ большого количества литературы и сделан хорошо.

Вторая глава описывает методы обработки экспериментальных данных, полученных в лаборатории Института физической химии Чешской академии наук. Описан метод расчета вероятностей переходов – приближение одноканальной теории квантового дефекта, а также различные приемы, используемые при анализе экспериментальных данных – калибровка спектров, усреднение временных профилей, извлечение энергетических уровней из полученных линий переходов.

Третья и четвертая главы посвящены непосредственно анализу в инфракрасной области спектров атомов металлов лития, натрия, рубидия, кальция, магния, стронция, цинка и индия. Расчеты сил осцилляторов и вероятностей переходов методом квантового дефекта проведены для каждого конкретного атома для большого количества переходов. С использованием расчетов матричных элементов стало возможно идентифицировать более ста

новых инфракрасных линий. Опубликовано большое количество таблиц линий переходов с указанием погрешностей, таблиц значений экспериментально полученных f , g , h уровней исследуемых атомов, а также таблиц с рассчитанными методом квантового дефекта значениями сил осцилляторов и вероятностей переходов с использованием новых полученных значений энергетических уровней.

Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации

Результаты, полученные в диссертации, позволят существенно дополнить и обновить информацию, имеющуюся спектроскопические базы данных. Новые переходы с ридберговских состояний помогут определить неизвестные ранее (либо уточнить уже известные) значения энергий этих ридберговских состояний. Массивы значений дипольных матричных элементов, рассчитанные с помощью специально адаптированного одноканального метода квантового дефекта, могут широко использоваться в астрофизических расчётах, например, в моделях атмосфер звезд или планет.

Замечания

При рассмотрении кандидатской диссертации Занозиной Е.М. возникли следующие замечания:

1. Не совсем понятно описана цель и реализация усреднения спектральных линий по временному профилю в разделе 2.1.1. Насколько важно такое усреднение вокруг максимальной интенсивности? Почему бы не брать усреднение по всему временному интервалу? Нигде не объясняется поведение интенсивности некоторых линий как функций времени, когда интенсивность к концу растёт или осциллирует. С чем может быть связано такое поведение?
2. В работе утверждается, что в плазме соблюдается условие локального термодинамического равновесия, что в целом требует дополнительного

исследования и доказательства. Не хватает анализа исследуемой плазмы, полученной в процессе лазерной абляции.

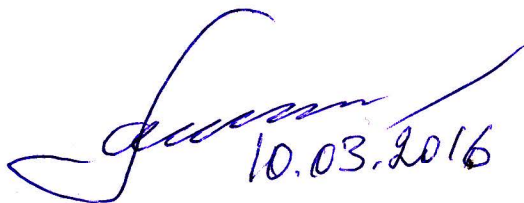
3. В работе часто утверждается, что в существующей литературе нет данных по тому или иному атому в диапазоне ниже 1800 см^{-1} , без уточнения, что отсутствуют именно лабораторные данные. Если открыть базу данных NIST, то расчетные данные найти иногда можно.
4. Формулы (2.17) для расчета матричных элементов написаны в слишком общем виде, и не совсем понятно, чем отличался расчет сил осцилляторов для разных атомов.
5. Единицы измерения длин волн линий на протяжении всей работы используются разные – то обратные сантиметры, то микроны, что иногда не удобно для сравнения.
6. Присутствуют стилистические ошибки и опечатки, но на понимание текста это не влияет.

Отмеченные выше недостатки не снижают общего положительного впечатления от кандидатской диссертации Е.М. Занозиной «Ридберговские инфракрасные спектры атомов металлов, полученные в результате лазерной абляции». Диссертация является законченной научно-квалификационной работой, излагаемые в ней результаты обладают научной новизной и являются существенным вкладом в атомную спектроскопию, а также могут быть использованы в физике низкотемпературной плазмы, астрофизике и астрохимии. Результаты работы докладывались на международных конференциях и опубликованы в 7 статья в журналах, входящих в базу данных Web of Science и список ВАК.

Диссертация «Ридберговские инфракрасные спектры атомов металлов, полученные в результате лазерной абляции» удовлетворяет требованиям п. 7 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 30.01.2002 г. № 74 (с изменениями, внесенными Постановлением Правительства РФ от 20.06.2011 г. № 475), а ее

автор Занозина Екатерина Михайловна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – «Оптика».

Заведующий отделом Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физический институт им. П.Н.Лебедева Российской академии наук (ФИАН),
доктор физико-математических наук,
профессор



10.03.2016

Очкин Владимир Николаевич

Подпись зав. отделом ФИАН,
дфмн, профессора Очкина В.Н. заверяю
Ученый секретарь ФИАН, кфмн



Цвентух Михаил Михайлович

Адрес: 119991 Москва, Ленинский проспект, д.53 ФИАН

E-mail: ochkin@sci.lebedev.ru

Телефон: + 7 (499) 132-65-21