

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Никитиной Елизаветы Андреевны «Оптические свойства ридберговских ионов щелочноземельных элементов», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – «Теоретическая физика».

Актуальность и практическая значимость диссертационной работы.

Исследование процессов взаимодействия атомов, ионов и молекул с электромагнитным излучением является одним из ведущих направлений современной физики. В частности, достоверная информация о спектроскопических характеристиках ридберговских уровней положительных ионов, таких как спонтанное и термоиндуцированное уширение, полное время жизни, энергетический сдвиг уровня могут быть востребованы во многих современных исследованиях, связанных с планированием экспериментов с изолированными ионами в ионных ловушках. На начальных этапах исследований полезными могут оказаться также простые аппроксимационные оценки этих характеристик.

В диссертационной работе Елизаветы Андреевны Никитиной на основе одноэлектронных полуэмпирических методов выполнены расчеты радиационных высоковозбужденных уровней положительных ионов щелочноземельных элементов, находящихся в поле теплового излучения. Результаты теоретического исследования пределов применимости методов квантового дефекта и модельного потенциала Фьюса к расчетам амплитуд спонтанных и термоиндуцированных переходов в одноэлектронных ионах, могут быть использованы для дальнейшего развития теории взаимодействия возбужденных атомов и ионов с внешними полями.

Общая характеристика диссертационной работы.

Диссертация Никитиной Е. А. «Оптические свойства ридберговских ионов щелочноземельных элементов» содержит 3 главы, введение, заключение и список литературы. Диссертация изложена на 111 страницах, включая 22 таблицы и 4 рисунка.

Во введении сформулированы актуальность, научная новизна и практическая значимость исследования, определен личный вклад автора и степень достоверности полученных результатов, содержится информация об апробации работы и публикациях по теме диссертационного исследования, приведены научные положения, полученные автором и выносимые на защиту.

Первая глава посвящена описанию основных оптических свойств энергетических уровней ионов, исследуемых в работе, определяемых как естественными радиационными переходами, так и термоиндуцированными распадами и возбуждениями.

В первой главе описаны индуцированные тепловым излучением внутриатомные процессы, приведены формулы для численных расчетов основных оптических характеристик ридберговских уровней (естественного и полного времен жизни, спонтанного и теплового уширений, термоиндуцированного энергетического сдвига).

Основным результатом второй главы, посвященной исследованию и сравнению метода квантового дефекта и метода модельного потенциала Фьюса, следует считать критерий применимости полуэмпирических методов к расчетам амплитуд радиационных переходов. Продемонстрирована связь способа суммирования сил осцилляторов с асимптотическими значениями термоиндуцированных сдвига и уширения, на основе данной закономерности сделан вывод о большей обоснованности применимости метода квантового дефекта в сравнении с методом модельного потенциала Фьюса в расчетах термоиндуцированных сдвига и уширения ридберговских уровней однократных ионов щелочноземельных элементов.

Третья глава содержит численные результаты расчетов оптических свойств, а также полиномиальные аппроксимации зависимостей этих свойств от главного квантового числа уровня и температуры излучения. Таблицы численных значений уширений, индуцированных радиационными переходами разных типов, могут служить справочной информацией для дальнейших исследований оптических свойств однократных щелочноземельных ионов. Параметры аппроксимационных формул, представленные в работе, могут быть востребованы для оценки оптических свойств большого массива высоковозбужденных уровней одноэлектронных ионов щелочноземельных металлов.

Заключение отражает основные результаты проведенных исследований, а также рекомендации по практическому применению этих результатов.

Научная новизна.

В диссертационной работе были получены следующие новые результаты и научные положения:

1. Зависимость правила сумм сил осцилляторов от параметров нелокальной части модельного потенциала Фьюса.
2. Критерий применимости полуэмпирических атомных потенциалов к расчетам термоиндуцированных процессов.
3. Асимптотические аппроксимации для термоиндуцированных скоростей распадов, возбуждений и ионизации, способ оценки вклада переходов в непрерывный спектр в общую скорость распада ридберговского состояния.
4. Аппроксимационные зависимости термоиндуцированного сдвига от номера уровня и температуры излучения.

Достоверность и обоснованность научных положений, выводов и рекомендаций, изложенных в диссертационной работе.

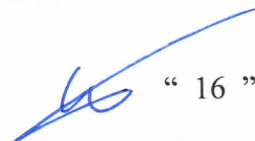
Обоснованность научных положений и выводов, приведенных в диссертации, обусловлена использованием известных методов теоретической физики и апробированного математического аппарата. Результаты диссертационной работы обсуждались на международных научных конференциях, а также достаточно полно изложены в 14 публикациях по теме исследования, 5 из которых включены в перечень, рекомендованный ВАК РФ. Достоверность полученных результатов подтверждается согласием полученных формул с известными результатами квазиклассического подхода, а также представленных численных результатов с наиболее достоверными данными научной литературы.

Замечания.

1. Поскольку одноэлектронная волновая функция экспоненциально затухает, то вызывает сомнения утверждение (стр. 27), что волновая функция на больших расстояниях от ядра дает основной вклад в характеристики взаимодействия атома с внешними полями.
2. Число переходов в вышележащие состояния не убывает, а остается бесконечным при любом исходном уровне. Изменяется лишь способ описания разных переходов. Поэтому утверждение на стр. 72 кажется необоснованным.
3. На стр. 73 утверждается, что расчет вероятностей ионизации является численным. Это верно только для МКД. В ММП расчет вероятности ионизации аналитический и, поскольку, связано-свободные переходы учитываются оценочно, этот метод для таких переходов предпочтителен.
4. Применимость дипольного приближения для переходов из ридберговских состояний в несоседние вышележащие дискретные состояния и состояния непрерывного спектра, особенно для тяжелых ионов, нуждается в обосновании.
5. Текст диссертации не свободен от технических погрешностей. Так, в диссертации пишется о внутриатомных переходах (стр.74, 75), хотя описываются ионы. Часть величин не определена (например, Γ^{rem} , ε , верхние индексы коэффициентов полиномов (3.71) и (3.18)). Полиномиальная интерполяция (стр. 76) не позволяет определить коэффициенты аппроксимации.
6. Точность регрессионного описания (3.10) (например среднеквадратичное отклонение) в диссертации не приведена. Для тяжелых ионов необходим учет тонкой структуры, однако коэффициенты разложения (3.10) определяются только орбитальным числом.

7. Выбор полиномиального по обратным степеням квантового числа базиса регрессии обусловлен поведением сечений при малых орбитальных числах. Базис регрессии в общем случае нуждается в более подробном обосновании.
8. Коэффициенты аппроксимации (3.18) зависят от температуры. Из таблицы 3.12 не следует слабая зависимость коэффициентов разложения (3.17) от температуры. Поэтому желательно в явном виде определить температурную зависимость коэффициентов полинома (3.17).

Указанные выше замечания и недостатки могут быть устранены в ходе дальнейшей работы и не снижают общей положительной оценки диссертационного исследования Е. А. Никитиной, которое представляет собой законченную научно-квалификационную работу, соответствующую требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям (Положение о порядке присуждения ученых степеней от 24.09.2013). Диссертация Никитиной Елизаветы Андреевны изложена литературным языком, содержит достаточно таблиц и иллюстраций. Автореферат диссертации правильно описывает ее содержание. Основное содержание прошло апробацию и опубликовано, в том числе и в изданиях, индексируемых в базах Web of Science и Scopus. В связи с вышеизложенным, считаю, что Никитина Елизавета Андреевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – «Теоретическая физика».

 “ 16 ” мая 2016 г.

Официальный оппонент, кандидат физ.-мат. наук, Преображенский Михаил Артемьевич
Воронежский государственный архитектурно-строительный университет, строительно-технологический институт, кафедра физики, доцент.



E-mail: pre4067@yandex.ru

Тел. +7 (473) 271-50-04

Адрес: Воронежский государственный архитектурно-строительный университет,
394006, г. Воронеж, ул. 20-летия Октября, д. 84