

ОТЗЫВ

официального оппонента доктора физ.-мат. наук Дербова Владимира Леонардовича на диссертацию Икоевой Кетино Хазбиевны «Комптоновское рассеяние фотона электронами атома, атомного иона и линейной молекулы», представленную к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Данные прецизионных измерений спектров рассеяния электромагнитного излучения веществом обнаруживают их сильную немонотонность. Для надёжной интерпретации экспериментальных результатов особую актуальность приобретает проблема учета многоэлектронных корреляций при взаимодействии фотона с такими фундаментальными квантовыми системами как свободные атомы, их ионы и молекулы. Диссертация К.Х. Икоевой посвящена исследованию роли многоэлектронных эффектов при теоретическом описании нелинейного процесса нерезонансного комптоновского рассеяния (НКР) фотона электронами этих систем. Актуальность и практическая важность темы диссертации представляются несомненными, поскольку детальное знание особенностей спектрального поведения сечений НКР необходимо при разработке прецизионных рентгеновских методов исследования электронного строения вещества, в частности, при изучении новых биологически важных соединений. Ряд результатов и выводов диссертации имеет самостоятельное научное значение для дальнейшего развития физики взаимодействия атомных систем с фотонами высоких энергий.

В диссертации в первом порядке теории возмущений по оператору контактного взаимодействия развит вариант методов расчета дважды дифференциального сечения НКР электромагнитного излучения электронами атома и атомного иона с d -симметрией в остове вне рамок широко используемого импульсного приближения и приближения некогерентной функции рассеяния. Метод реализован в комплексе программ, позволяющих оценивать вклады многоэлектронных эффектов при расчетах спектральных характеристик процесса комптоновского рассеяния.

Основной целью диссертации Икоевой К.Х. является теоретическое описание и интерпретация спектров НКР электронами многочастичных систем при условии, что энергия квантов падающего излучения значительно выше порогов ионизации электронных оболочек системы. Для этого потребовалось впервые решить ряд задач, определивших новизну исследования:

- выявить роль эффектов монополюной (радиальной) перестройки электронных оболочек и межоболочечных корреляций в процессе НКР электронами свободного атома;
- описать эволюцию спектров НКР при переходе от нейтрального атома к положительным ионам его изоэлектронной последовательности;
- установить индивидуальную (по симметрии возбуждения/ионизации) роль ориентационных эффектов в процессе НКР электронами линейной молекулы.

Решение указанных задач проведено на основе хорошо апробированных методов современной квантовой теории. Достоверность результатов развитой теории подтверждается их согласием с экспериментальными данными в тех случаях, когда таковые уже известны, а также с общепризнанными и устоявшимися физическими представлениями.

Диссертация изложена на 124 страницах, содержит список литературы из 133 наименований, 22 рисунка и 7 таблиц.

Во введении автором определены цели исследования и основные задачи, решаемые в диссертации. Обоснованы ее актуальность, новизна, сформулированы основные положения, выносимые на защиту.

В первой обзорной главе рассмотрены работы по теоретическому и экспериментальному исследованию процесса нерезонансного неупругого рассеяния фотона многоэлектронными системами. Основное внимание уделено анализу существующих теоретических моделей, прежде всего, модификациям импульсного приближения и приближения некогерентной функции рассеяния.

Во второй главе развит метод расчета спектра НКР как контактного неупругого рассеяния фотона многоэлектронной системой. В Разделе 2.1 представлено аналитическое выражение для расчета дважды дифференциального сечения НКР фотона электронами системы с 1S_0 -термом основного состояния атома и d -симметрией в остове, когда конечным состоянием рассеяния оказывается состояние «атомный остаток, рассеянный фотон \oplus электрон в сплошном спектре». В разделе 2.2 на примере свободного атома Zn выполнен расчет абсолютных значений и формы дважды дифференциального сечения комптоновского рассеяния фотона электронами атома с d -симметрией в остове. Учтены эффекты упругого томсоновского и рэлеевского рассеяния. Расчеты выполнены для углов и энергий падающих фотонов, использованных в существующих экспериментах, с которыми получено хорошее (различие $\sim 2-4\%$) согласие.

В разделе 2.3 впервые исследован нелинейный процесс НКР фотона электронами многозарядного атомного иона с d -симметрией валентной

оболочки остова для изоэлектронного ряда никелеподобных ионов Zn^{2+} , Kr^{8+} и Mo^{14+} . Показано, что определяющий вклад в вероятность рассеяния вносит многоэлектронная $3d$ -оболочка иона. С увеличением заряда ядра иона абсолютные значения максимумов вкладов заметно уменьшаются, при этом комптоновские профили заметно расширяются.

В Разделе 2.4 на примере атома Ag в рамках метода смешивания конфигураций развит алгоритм расчета, позволяющий исследовать степень влияния эффекта межоболочечных корреляций на абсолютные значения и структуру дважды дифференциального сечения НКР в диапазонах энергий, значительно превышающих энергии порогов ионизации оболочек. Несмотря на незначительность ($\sim 1 - 3\%$) обнаруженного в данном частном случае вклада корреляций, важны полученные здесь методические результаты, касающиеся корректности используемых приближений и правомочности применения соответствующих расчетных схем.

Третья глава посвящена теоретическому исследованию НКР электромагнитного излучения электронами линейной молекулы с учетом многочастичных и ориентационных эффектов на примере свободной неоноподобной молекулы HF. В разделе 3.1 без использования импульсного приближения построено дважды дифференциальное сечение комптоновского рассеяния в рамках одноцентрового нерелятивистского описания молекулярных орбиталей (МО). Учтены эффекты радиальной релаксации волновых функций остова и ионизированных состояний рассеяния в полях образующихся вакансий. Описаны использованные при расчетах типы ориентации молекулы, рассеивающей фотон.

В разделе 3.2 впервые теоретически исследовано НКР фотона электронами линейной молекулы и проведено обсуждение результатов. Для трех схем предполагаемого эксперимента рассчитаны абсолютные величины и форма дважды дифференциального сечения НКР.

Работа вызывает ряд **замечаний**:

1. Название «Комптоновское рассеяние фотона электронами атома, атомного иона и линейной молекулы» слишком глобально для кандидатской диссертации, сам автор отмечает, что данной проблеме посвящено более 3000 работ в WoS (стр. 13).
2. В названии главы 1 «результаты исследований» следовало бы заменить на более точное «обзор».
3. Защищаемое положение 4 оставляет без ответа естественный вопрос в чем именно заключается сильный ориентационный эффект.
4. Убедительность указаний на «возможность получения богатой информации о физической структуре рассеивающих систем, их

- спектральных характеристиках» из НКР (например, стр. 13) сильно выиграла бы от уточнения: какая это информация, как она извлекается и в чем ее ценность.
5. Имеется ряд неудачных оборотов и выражений, смысл которых не вполне ясен, например, «...указанные ниже в настоящем обзоре литературные источники ни в коей мере не претендуют на его полноту» (стр. 13-14. Постоянно употребляемые выделения курсивом настолько многочисленны, что теряют смысл. Встречаются технические ошибки (пропущенные слова, несогласованные падежи, опечатки).
 6. Стр. 31: «Из большого числа опубликованных к настоящему времени в научной литературе работ укажем основные теоретические работы [39–43], выполненные в рамках нерелятивистского приближения некогерентной функции рассеяния и его нерелятивистских модификаций [44,45]. Но, поскольку результаты, представленные в нашей диссертации, сравниваются лишь с результатами, полученными в рамках импульсного приближения, мы не даем описания результатов выше указанных работ.» А почему бы такое сравнение не провести?
 7. В целом, обзор работ в главе 1 оставляет впечатление некоторой хаотичности и недостатка конкретных свидетельств в пользу необходимости выхода за рамки общепринятых приближений. Не приводится конкретных сравнений теории и эксперимента, из которого была бы видна недостаточность указанных приближений.
 8. В начале главы 2 говорится, что «круг экспериментальных и теоретических исследований внеэмиссионных рентгеновских областей сечения процесса комптоновского рассеяния электромагнитного излучения атомами, ионами и молекулами в основном ограничен рамками схемы импульсного приближения». Неясно, в каком смысле теоретическое приближение может ограничивать круг экспериментальных исследований. Надо ли это понимать так, что экспериментаторы сознательно не идут туда, где теория плохо работает?
 9. Подпись к рис. 2.8: «Расчет проведен на примере фиксированной энергии $\hbar\omega_1 = 25$ кэВ фотона, падающего на атомный ион Mo^{14+} . Угол рассеяния $\theta = 90^\circ$.» Эти детали лишние, так как приведенный график функций Бесселя имеет универсальный характер.
 10. Стр. 68: «Как известно [70], если даже расчет структуры атома, проведенный в рамках метода самосогласованного поля по схеме Хартри-Фока, выполнен корректно, то полученная энергия системы отличается от истинной.» Недостаточность приближения ССП Хартри-Фока общеизвестна, а если расчет еще и неправильный, то не о чем говорить

вообще. Возможно, автор имел в виду дополнительные приближения, употребляемые в квантовой химии, но из текста это не следует.

Замечания относятся к качеству изложения и не затрагивают сути исследований, выполненных на высоком научном уровне. Полученные результаты являются новыми, они в значительной степени детализируют и уточняют наши представления о взаимодействии электромагнитного излучения с веществом. Качество результатов подтверждает и то, что практически все они опубликованы в журналах из Перечня ВАК (10 статей!).

Автореферат диссертации верно отражает содержание диссертации, которая соответствует паспорту специальности 01.04.05 -оптика.

Диссертация удовлетворяет требованиям п. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 года №842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор Икоева Кетино Хазбиевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 - оптика.

Официальный оппонент



Дербов Владимир Леонардович

Профессор кафедры теоретической физики,

доктор физико-математических наук

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»

410012 Саратов, ул. Астраханская, 83

Телефон: +7 927 220 8353

Адрес электронной почты: derbovvl@gmail.com

Подпись проф. Дербова В.Л

ЗАВЕРЯЮ:

Ученый секретарь СГУ, доцент



2018 г.

