

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по научной и
исследовательской деятельности
Южного федерального университета
доктор химических наук, доцент

А.В. Метелица

« 14 »

2018 г.



ОТЗЫВ

ведущей организации федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южный федеральный университет» о диссертационной работе Икоевой Кетино Хазбиевны «Комптоновское рассеяние фотона электронами атома, атомного иона и линейной молекулы», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика

Работа К.Х. Икоевой посвящена теоретическому исследованию спектроскопических характеристик фундаментального процесса комптоновского рассеяния электромагнитного излучения многоэлектронными системами при условии, что энергия падающего на систему излучения значительно превышает энергии порогов ионизации её электронных оболочек. Целью диссертации является теоретическое исследование роли эффектов радиальной релаксации электронных оболочек и межоболочечных корреляций при нерезонансном комптоновском рассеянии, описание изменений, порядка и закономерностей формирования структур спектров при переходе от нейтрального атома к ионам его изоэлектронной последовательности, установление роли ориентационных эффектов при нерезонансном комптоновском рассеянии фотона электронами молекулы.

Информация о таких характеристиках необходима для решения

большого числа задач в области современной физики при детальной интерпретации результатов исследований, например, в области осуществления лазерного термоядерного синтеза, астрофизике, при синтезе и изучении новых биологически важных соединений, их реакционной способности, решении задач медицинской диагностики.

Работы по исследованию нелинейного процесса комптоновского рассеяния, начавшиеся более пятидесяти лет назад, в настоящее время получили новый импульс для разработки новых экспериментальных методов анализа, синтеза и контроля ориентированных в пространстве многоэлектронных систем.

Таким образом, тема диссертации К.Х. Икоевой представляется **актуальной** как с точки зрения решения фундаментальных задач, так и для прикладных исследований.

Диссертация К.Х. Икоевой состоит из Введения, 3-х глав, Заключения и Списка цитируемой литературы. Материалы диссертации опубликованы в 13 печатных работах: из них 10 статей в рецензируемых отечественных и зарубежных журналах и 3 работы в тезисах конференций.

Во **Введении** сформулированы цели и задачи, актуальность, новизна и научная значимость работы, изложены основные положения, выносимые на защиту, представлен обзор литературы, в котором анализируются основные работы, касающиеся исследований в области процессов комптоновского рассеяния электромагнитного излучения многоэлектронными системами.

В первой главе диссертации **Нерезонансное комптоновское рассеяние фотона многоэлектронными системами (результаты исследований)** представлен обзор литературы, в котором анализируются основные работы, касающиеся исследований в области процессов комптоновского рассеяния электромагнитного излучения многоэлектронными системами. Анализ существующих в литературе результатов привёл автора к выводу: для избавления от физически некорректных допущений, присущих часто

используемым приближениям (прежде всего, импульсному приближению) при описании и интерпретации экспериментальных спектров, необходима разработка новых квантовомеханических методов описания процесса комптоновского рассеяния электромагнитного излучения многоэлектронными системами.

Во второй главе диссертации **Нерезонансное комптоновское рассеяние фотона электронами атома и атомного иона** на примере атома Zn, вне схем приближения некогерентной функции и импульсного приближения рассеяния, развит вариант нерелятивистской квантовой теории и соответствующих методов расчета спектров комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами многоэлектронного атома с 1S_1 -термом основного состояния и d -симметрией в остоле. Исследовано влияние многоэлектронных эффектов радиальной релаксации электронных оболочек в поле возникающих остовных вакансий и межоболочечных корреляций (атом Ar) на вероятность процесса рассеяния. Полученные результаты хорошо согласуются с результатами имеющихся в литературе экспериментов по исследованию процесса комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами атома. Разработанные методы расчета применены впервые к описанию процесса рассеяния электромагнитного излучения электронами многозарядных атомных ионов изоэлектронной последовательности. Исследована угловая и энергетическая зависимость дважды дифференциальных сечений комптоновского рассеяния электромагнитного излучения никелеподобными (Zn^{2+} , Kr^{8+} , Mo^{14+}) атомными ионами.

В третьей главе **Процесс нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами линейной молекулы** впервые, на примере молекулы фтороводорода HF, дано развитие нерелятивистской квантовой теории и методов расчета спектров нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами свободной линейной молекулы с $^1\Sigma$ термом основного

состояния. Изложены результаты исследований процесса нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами молекулы для трех типов её пространственной ориентации и проведено их обсуждение. Установлено, что переход между рассмотренными схемами эксперимента сопровождается сильным ориентационным эффектом.

В **Заключении** автор сформулировал основные результаты и выводы диссертации:

1. В первом порядке теории возмущений по квадратичному оператору контактного взаимодействия вне рамок модификаций импульсного приближения развиты методы расчёта спектральных характеристик нелинейного процесса комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами свободного атома и атомного иона с d -симметрией в остове.

2. Проведено исследование абсолютных значений и структуры дважды дифференциального сечения нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами свободного атома с d -оболочкой остова. Полученные результаты имеют предсказательный характер. Для энергий падающих фотонов 14.93 и 22.10 кэВ и углах рассеяния 141 и 133° результаты диссертации хорошо согласуются с результатами экспериментов по измерению однократно дифференциального сечения процесса.

3. Для ряда Ni-подобных ионов с d -симметрией в остове исследована энергетическая и угловая зависимость процесса нерезонансного комптоновского рассеяния линейно поляризованного фотона электронами.

Исследование позволило установить:

- Имеет место эффект мультипольности каждого парциального канала рассеяния nl -оболочкой остова, существенно определяющий величину и направленность перераспределения вероятности нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами иона. При этом показано,

что с ростом заряда ядра Ni-подобного иона, при неизменных углах рассеяния и величинах энергии падающего на многоэлектронную систему фотона, происходит концентрация лидирующих гармоник по всем основным каналам рассеяния;

- интегральная интенсивность нерезонансного комптоновского рассеяния перераспределяется в длинноволновую область спектра рассеяния по энергии рассеянного фотона и в диапазон энергий комбинационного резонансного рассеяния перед линией рэлеевского и томсоновского упругого рассеяния.

4. Исследованы природа и роль эффекта межоболочечных корреляций в процессе нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами атома. Установлено, что эффект межоболочечных корреляций разнонаправленно воздействует на парциальные сечения процесса в $3s\epsilon l$ канале рассеяния. Установлено также, что при уменьшении энергии падающего фотона ширины комптоновских профилей как субвалентных, так и валентных оболочек атома-рассеивателя уменьшаются и, при этом, возрастает степень энергетического “разрешения” этих профилей. Как результат, эффект “гашения” сечения рассеяния фотона субвалентной оболочкой сечением рассеяния валентной оболочкой падает. При уменьшении энергии падающего фотона уменьшается роль “больших” гармоник в канале рассеяния субвалентной оболочкой.

5. На примере молекулы фтороводорода HF выполнено теоретическое исследование процесса нерезонансного комптоновского рассеяния электромагнитного излучения электронами линейной молекулы. В результате:

- вне рамок импульсного приближения предложен метод расчета сечения процесса нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами линейной молекулы в газовой фазе. Метод носит достаточно общий характер и применимость его к той или иной линейной молекуле

ограничена лишь требованием корректности использования нерелятивистских методов построения волновых функций молекулярных орбиталей состояний рассеяния;

- для трех схем предполагаемого эксперимента рассчитаны абсолютные величины и форма дважды дифференциального сечения процесса нерезонансного комптоновского рассеяния электронами неоноподобной молекулы HF. Установлено, что переход между рассмотренными схемами эксперимента сопровождается сильным ориентационным эффектом.

Наиболее важными результатами диссертации К.Х. Икоевой представляются полученные аналитические соотношения для расчета дважды дифференциального сечения нерезонансного комптоновского рассеяния фотона многоэлектронными системами с d -симметрией в остове. **Практический интерес** представляют полученные при этом результаты исследования энергетической и угловой зависимости процесса нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами Ni-подобных ионов. Новым результатом является также представленное в диссертации исследование спектральных характеристик нелинейного процесса нерезонансного комптоновского рассеяния электронами неоноподобной молекулы.

Наряду с перечисленными достоинствами, по диссертации К.Х. Икоевой следует сделать ряд замечаний:

1. в качестве объектов исследования автор ограничился многоэлектронными системами с заполненными оболочками в основном состоянии. Как результат, вне рамок диссертации осталось исследование эффектов несферичности начальных состояний на вероятность нерезонансного комптоновского рассеяния;
2. автор провел расчеты дифференциальных сечений нерезонансного комптоновского рассеяния для ряда атомных ионов изоэлектронной последовательности (Ni-подобные ионы). Ионы изоядерной последовательности остались вне рамок исследований автора, что снижает

- полноту результатов исследований, представленных в диссертации;
3. ориентируясь на большие ширины (невысокую степень) спектрального разрешения существующих и предполагаемых экспериментов, автор не провел расчетов резонансных (дискретных) структур дифференциального сечения комбинационного рассеяния в области перед линиями упругого рэлеевского и томсоновского рассеяния. Такие расчеты составили бы важный фрагмент диссертации;
 4. при исследовании нерезонансного комптоновского рассеяния фотона электронами линейной молекулы HF автор приводит лишь результаты своих расчетов вне рамок импульсного приближения. Таким образом, в отличие от случая атома (атомного иона), не приводится сравнения с результатами импульсного приближения, подвергаемого критике. Такое сравнение дополнило бы логику и методологию диссертации;
 5. к замечаниям по оформлению диссертации можно отнести имеющиеся опечатки, нестыковки падежей и неточности изложения. Например, в тексте содержится ссылка на формулу 1.1, в то время как имеется в виду формула 2.5.

Сделанные замечания не ставят под сомнение основные результаты и выводы диссертации, не снижают научной ценности выполненной работы. Автором были решены поставленные задачи и достигнуты основные цели исследования. Новизна, актуальность и научная ценность полученных результатов не вызывают сомнений. Полученные автором теоретические результаты представляются достоверными. Основные результаты диссертации опубликованы в 10 статьях в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК, докладывались на 3 международных и всероссийских научных конференциях.

Практическая значимость. Развитые в диссертации аспекты квантовой теории многочастичных систем и предложенные методы расчета могут быть обобщены, в частности, для твердых тел. Последнее определяет их ценность

для дальнейшего развития теории процесса рассеяния фотона веществом в конденсированном состоянии. Результаты диссертации целесообразно использовать в научно-исследовательских организациях и центрах, специализирующихся в области спектроскопии атомов, ионов и молекул, работающих над проблемами электронного строения вещества, взаимодействия ионизирующих излучений с веществом, установления роли многоэлектронных корреляций при интерпретации экспериментальных данных: в ФТИ им. А.Ф.Иоффе РАН (Санкт-Петербург), ИОНХ РАН (Москва), Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН (Москва), ИОЯФ РНЦ «Курчатовский Институт» (Москва), ФТИ УНЦ РАН (Ижевск), в Московском, Санкт-Петербургском, Южном федеральном, Воронежском, Саратовском, Новосибирском и Томском государственных университетах.

Заключение

Диссертация К.Х. Икоевой является научно-исследовательской работой, выполненной на высоком научном уровне. Автореферат и публикации полно и правильно отражают содержание диссертации, ее основные положения и выводы.

По объему, научной новизне, практической значимости и достоверности, диссертационная работа К.Х. Икоевой «Комптоновское рассеяние фотона электронами атома, атомного иона и линейной молекулы» полностью отвечает требованиям пп. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к диссертации на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, Икоева Кетина Хазбиевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 - оптика.

Отзыв подготовлен доктором физико-математических наук (специальность 01.04.07 «Физика конденсированного состояния»), профессором, заведующим кафедрой теоретической и вычислительной

физики физического факультета Южного федерального университета
Бугаевым Лусегеном Арменаковичем (г. Ростов-на-Дону, ул. Зорге, 5, тел.
+7-988-544-77-52, e-mail: bugaev@sfedu.ru).

Отзыв обсужден и утвержден на заседании кафедры теоретической и
вычислительной физики физического факультета федерального
государственного автономного образовательного учреждения высшего
образования «Южный федеральный университет» (протокол № 14 от «10»
Мая 2018 г..

Зав. кафедрой теоретической и
вычислительной физики
физического факультета
Южного федерального университета,
д.ф.-м.н., профессор


Лусеген Арменакович Бугаев

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Личную подпись Л. А. Бугаева

ЗАВЕРЯЮ:

Специалист по работе с персоналом
I категории Р. А. Кармазин

« 10 » 05 2018 г.