



«УТВЕРЖДАЮ»

директор ФГБУН

«Институт химической физики
им. Н.Н. Семенова РАН»,
академик Берлин А.А.

«23» сентября 2014 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертацию Алексеевой Ольги Сергеевны
«Радиационные процессы при взаимодействии атомов
с промежуточным типом связи угловых моментов»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук по специальности 01.04.05 – оптика

В диссертационной работе Алексеевой О.С. развиты полуэмпирические методы расчета взаимодействия атомов металлов второй группы (кадмий, ртуть) с промежуточным типом связи угловых моментов с атомами инертных газов (аргон, криптон, ксенон), а также взаимодействие атомов инертных газов друг с другом. Выбранная тема исследования представляется актуальной, так как наличие надежных данных по адиабатическим термам и дипольным моментам переходов является необходимым условием для расчета характеристик радиационных процессов, играющих важную роль в различных газовых и плазменных средах. Существующие неэмпирические методы расчетов для рассмотренных многоэлектронных систем надежной точности не обеспечивают.

Диссертация состоит из введения, четырех содержательных глав, заключения, списка использованной литературы и двух приложений.

Во введении автор обосновала выбор темы исследования, определила цели и задачи, научную новизну, привела краткое содержание глав работы.

В первой главе рассматривается взаимодействие возбужденных атомов металлов второй группы с атомами инертных газов в основном состоянии. Подробно описывается применяемый метод восстановления потенциалов взаимодействия в метастабильных квазимолекулярных состояниях из экспериментальных данных, полученных в результате анализа колебательных спектров, возникающих при переходах из возбужденных резонансных квазимолекулярных состояний в основное. Автор анализирует результаты спектроскопических экспериментов, исследующих взаимодействие атомов кадмия с атомами аргона и криптона. Далее приводит

рассчитанные для молекул CdA и CdKr полуэмпирические потенциалы взаимодействия для долгоживущих состояний 1^3P_2 , переходы из которых в основное состояние в пределе разъединенных атомов запрещены, и сравнивает полученные потенциалы с результатами *ab initio* расчетов.

Во второй главе полученные полуэмпирические потенциалы взаимодействия применяются для расчета вероятностей квазимолекулярных переходов из триплетного возбужденного 1^3P_2 в основное состояния, а также для описания на их основе спектров квазимолекулярного излучения и поглощения вблизи запрещенной атомной линии. Взаимодействие атомов в ходе столкновения приводит к зависимости дипольного момента перехода от межатомного расстояния. В результате становятся возможными оптические переходы, запрещенные в пределе разъединенных атомов. Важность задачи точного вычисления дипольных моментов и вероятностей переходов на основе надежной информации о потенциалах взаимодействия атомов в возбужденном и основном состояниях обусловлена тем, что расчеты формы линии для этих случаев являются наиболее чувствительными к исходным квантовохимическим данным.

В третьей главе вычислены радиационные времена жизни колебательных состояний и вероятности переходов из возбужденных колебательных состояний в основные для молекул CdAr, CdKr, HgAr, HgKr, HgXe. Для молекул HgAr, HgKr, HgXe автором были использованы потенциалы взаимодействия и вероятности квазимолекулярных переходов, полученные в более ранних работах вследствие отсутствия новых экспериментальных данных. Полученные зависимости радиационных времен жизни от значения колебательного квантового числа проанализированы с точки зрения поведения вероятности квазимолекулярного перехода. Приведенное сравнение с временами жизни соответствующих метастабильных атомных состояний подчеркивает принципиальную роль межатомного взаимодействия для кинетики формирования возбужденных состояний.

В четвертой главе в рамках квазистатического приближения рассмотрены процессы квазимолекулярного поглощения вблизи резонансных линий в смесях возбужденных атомов криптона и ксенона с атомами гелия в основном состоянии. Используемые в расчете потенциалы взаимодействия были получены ранее в рамках методов эффективного гамильтониана и псевдопотенциала. Автор приводит аргументы в пользу применения выбранных методов, кратко излагает принцип расчета. В качестве потенциалов взаимодействия в основном состоянии в расчете использованы экспериментальные потенциалы. Проведено сравнение с результатами

эксперимента, в котором спектры высокого разрешения были получены с использованием синхротронного излучения. Хорошее согласие рассчитанных и экспериментальных данных подтверждает достоверность полученных в работе результатов.

В заключении приводятся основные результаты диссертации.

Список литературы содержит 83 наименования.

Диссертация Алексеевой О.С. в рамках поставленных задач является законченным научным исследованием. Развитые в работе методы представляются весьма перспективными, так как они являются относительно простыми и обеспечивают достаточно высокую точность получаемых результатов. Это определяет теоретическую значимость проведенного диссертационного исследования. Более того, возможность прямого сравнения полученных спектров поглощения и излучения стимулирует дальнейшее проведение работы в данном направлении и обуславливает тем самым практическую значимость работы. Достоверность полученных автором результатов обеспечено хорошим согласием с результатами *ab initio* расчетов и спектроскопических экспериментов. Результаты диссертации были широко представлены на международных конференциях и опубликованы в ведущих отечественных и зарубежных научных журналах (4 публикации в журналах, включенных в международные базы цитирования, и 1 публикация в российском журнале из перечня ВАК). Автореферат диссертации полно и правильно отражает ее содержание.

Несмотря на отмеченные достоинства работы, уместно сделать ряд замечаний.

Во-первых, в работе отсутствует обзор литературы в традиционном смысле. Было бы желательно перечислить во Введении существующие вычислительные методы атомной физики, их достоинства и недостатки, выявить место используемого метода эффективного гамильтониана среди них.

Во-вторых, приведенные в Главе 2 рисунки со спектрами поглощения и излучения для различных значений температур не очень информативны. Для перспективы экспериментальной проверки полученных результатов предпочтительнее было бы привести графики температурных зависимостей полуширин спектров.

В-третьих, на экспериментальных спектрах поглощения смесей $Kr^* + He$, $He^* + He$, приведенных на рисунках 20 и 21, соответственно, видны особенности, отсутствующие в вычисленных спектрах. Этот факт не обсуждается в тексте диссертации.

