

## ОТЗЫВ

официального оппонента 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

Диссертация Алексеевой О.С. посвящена теоретическому исследованию радиационных процессов, обусловленных взаимодействием атомов с промежуточным типом связи угловых моментов. В первых трех главах работы рассматриваются квазимолекулы, образующихся при взаимодействии атомов кадмия и ртути с атомами тяжелых инертных газов (аргон, криптон, ксенон) в основном состоянии. Такие ван-дер-ваальсовы молекулы являются на сегодняшний день объектом многих теоретических и экспериментальных исследований. Такой интерес обусловлен рядом причин. Во-первых, для таких молекул характерны очень малые значения энергий диссоциации, что приводит к определенным трудностям в их изучении и стимулирует развитие экспериментальных методов. Это обуславливает практический интерес. Во-вторых, детальное понимание механизма межатомного взаимодействия в таких простых ван-дер-ваальсовых молекулах может стать основой рассмотрения более сложных объектов – кластеров. В этом смысле простейшие ван-дер-ваальсовы молекулы представляют теоретический интерес, являясь объектом для проверки различных теоретических моделей. В четвертой главе рассматривается взаимодействие возбужденных атомов криптона и ксенона с атомами гелия в основном состоянии, приводящее к формированию полосы поглощения вблизи резонансной атомной линии. Смеси инертных газов широко применяются как в фундаментальных исследованиях, так и в технике, поэтому их оптические свойства, несомненно, представляют интерес. Все сказанное выше позволяет сделать вывод, что выбранная тема диссертационного исследования является актуальной. Степень обоснованности и достоверности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, а также теоретическая и практическая значимость работы не вызывают сомнений.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка использованной литературы, насчитывающего 83 наименования.

Во введении обосновывается актуальность темы диссертационной работы, формулируются цели и задачи исследования, положения, выносимые на защиту, обсуждаются практическая значимость и достоверность полученных результатов, научная

новизна, приводится краткое содержание работы, а также список конференций, на которых были представлены результаты.

Первая глава посвящена определению полуэмпирических потенциалов взаимодействия квазимолекул CdAg, CdKг. Потенциалы взаимодействия восстанавливаются из имеющихся экспериментальных данных для излучающих состояний с использованием методов эффективного гамильтониана и анализа квазимолекулярных термов. Выбранные методы за счет их простоты позволяют автору получить данные по энергетическим термам для рассматриваемых молекул CdAg и CdKг в метастабильных состояниях, избегая трудоемких квантово-химических расчетов. Использование данных последних спектроскопических экспериментов обеспечивает надежность полученных автором результатов. Это, в частности, подтверждается хорошим согласием с результатами вариационных расчетов, сравнение с которыми также приводится в данной главе.

Вторая глава посвящена теоретическому рассмотрению процессов столкновительно-индуцированного поглощения и излучения смесей CdAg и CdKг вблизи запрещенной атомной линии. Указанные процессы обусловлены взаимодействием атомов и представляют интерес, т. к. существенно влияют на время жизни метастабильных состояний. С использованием потенциалов взаимодействия, полученных в первой главе, вычисляются спектральные распределения коэффициента поглощения, спектры излучения и константы скорости процессов радиационного тушения метастабильного состояния для смесей CdAg и CdKг для двух значений температур ( $T = 300$  К и  $T = 700$  К), проводится анализ полученных спектров. По результатам вычислений делается вывод, что наибольший вклад в излучение рассматриваемых смесей вблизи запрещенной атомной линии дает столкновительно-индуцированное тушение атомного метастабильного состояния за счет межатомного взаимодействия. Вычисление спектров поглощения и излучения требует, помимо знания потенциалов взаимодействия в основном и возбужденном состояниях, определения зависимости вероятностей (или дипольных моментов) переходов от межъядерного расстояния. При вычислении этих зависимостей диссертант использует амплитуды разложения адиабатических квазимолекулярных волновых функций по диабатическим функциям промежуточного типа связи угловых моментов, полученные в результате диагонализации матрицы эффективного гамильтониана в главе 1. Данный метод наглядно показывает, что зависимость вероятности перехода от расстояния между взаимодействующими атомами определяется вкладом волновых функций излучающих состояний в функции метастабильного состояния. Полученные зависимости матричных элементов дипольных моментов от

межъядерного расстояния представляют самостоятельный интерес, являясь важными квантово-химическими данными, необходимыми при рассмотрении запрещенных в пределе разъединенных атомов переходов.

Третья глава посвящена вычислению радиационных времен жизни колебательных состояний и вероятностей связанно-связанных переходов из возбужденного состояния в основное для квазимолекул CdAr, CdKr, HgAr, HgKr, HgXe, приводятся обсуждение характера зависимостей полученных времен жизни от значения колебательного квантового числа и сравнение их с временами жизни метастабильных атомных состояний Cd( $5^3P_2$ ) и Hg( $6^3P_2$ ). При расчетах для CdKr и CdAr использованы полученные диссертантом в предыдущих главах зависимости вероятностей радиационных переходов от межъядерного расстояния и параметры потенциалов взаимодействия в возбужденных состояниях. Для квазимолекул HgAr, HgKr, HgXe автор использует результаты предыдущих исследований.

В четвертой главе рассматриваются процессы квазимолекулярного поглощения вблизи резонансных линий в смесях Kr\*+He и Xe\*+He. Смеси инертных газов применяются во многих областях науки и техники, в частности, в спектроскопии. Для анализа спектров этих смесей необходима детальная информация о термах. Однако расчет потенциалов взаимодействия атомов инертных газов друг с другом представляет собой трудоемкую и сложную задачу. В основе расчета спектров поглощения, проведенного в диссертационной работе Алексеевой О.С., лежат потенциалы взаимодействия, вычисленные в рамках модифицированного метода псевдопотенциала в более ранних исследованиях. Диссертант кратко излагает суть метода, обосновывает его применение к случаю взаимодействия возбужденного электрона с атомом гелия, приводит результаты. Вычисленные на базе этих потенциалов спектры поглощения сравниваются с результатами недавних экспериментов. При этом наблюдается удовлетворительное согласие эксперимента и вычислений, что позволяет сделать вывод об эффективности применения метода псевдопотенциала к расчету взаимодействия возбужденных атомов инертных газов с атомами гелия в основном состоянии.

В заключении приводятся основные результаты диссертации.

Результаты проведенного автором исследования представляют как фундаментальный, так и практический интерес. В работе развиваются полуэмпирические методы расчета взаимодействия атомов. Их простота, физическая ясность и надежность получаемых результатов позволяют ожидать, что данные методы могут найти применение в расчетах более сложных систем. Полученные в диссертации полуэмпирические потенциалы взаимодействия, а также вероятности радиационных переходов и

радиационные времена жизни могут быть использованы при моделировании элементарных процессов, происходящих в газовых средах и низкотемпературной плазме. Представление результатов исследования в форме, позволяющей провести непосредственное сравнение с данными эксперимента, обуславливает их достоверность и обоснованность.

Вместе с тем имеется ряд замечаний к рецензируемой работе.

1. В диссертации отсутствуют определения используемых систем координат, квазимолекулярных термов (адиабатических молекулярных или квазимолекулярных потенциальных энергий) и уравнений для решения задачи ядерной динамики. Дело в том, что (квази)молекулярные термы, занимающие центральное место в диссертации, не являются физически наблюдаемыми величинами, а являются удобным теоретическим инструментом. В разных подходах они определяются по-разному и, соответственно, могут иметь разные значения. Все определяется тем, как выглядят уравнения ядерной динамики, и какие термы этих уравнений включены в функции, которые названы молекулярными термами. В свою очередь, вид динамических уравнений определяется используемыми координатами. Поэтому следовало бы с самого начала определить систему координат для описания квазимолекулы, определить молекулярные термы и записать динамические уравнения. Видимо, в диссертации молчаливо полагается использование стандартного адиабатического подхода или даже приближения Борна-Оппенгеймера, но даже в рамках этого подхода использование разных координат приводит к разным определениям молекулярных потенциальных энергий и к разным формам динамических уравнений. Так, например, в диссертации постоянно попеременно используются «межъядерное расстояние» и «межатомное расстояние», которые соответствуют различным системам координат. В итоге это определяет строгость описания используемых подходов и точность конечных результатов.
2. В параграфе 3.5 «Анализ полученных результатов» анализируются времена жизни, полученные на основании расчета стационарных волновых функций квантового решения ядерной динамики. При этом полученные результаты анализируются с помощью понятий «периода колебаний» и «времени нахождения» молекулы в тех или иных областях координатного пространства, что, видимо, опирается на классические представления нестационарной задачи. Представляется, что анализ результатов, опирающийся только на рассчитанные стационарные волновые функции, был бы более логичным.

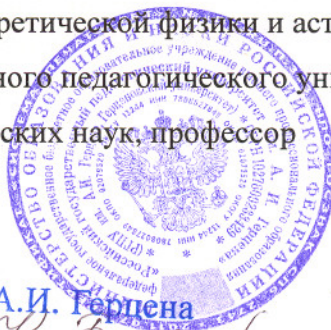
3. В главе 4, в частности, в параграфе 4.2 исследуемая квазимолекула  $X^*Y$  рассматривается как «трехчастичная система, состоящая из иона  $X^+$ , электрона  $e$  и атома инертного газа  $Y$  в основном состоянии». Гамильтониан квазимолекулы определен уравнением (25), в котором присутствует эффективный гамильтониан атома  $Y$ . При этом остается неясным, имеется ли в виду полный гамильтониан или электронный гамильтониан, и если последнее, то какой смысл несет эффективный гамильтониан атома  $Y$  в рамках трехчастичного рассмотрения (учета только одного электрона атома  $X$ ). Естественно, электроны атома  $Y$  определяют обменный и поляризационный потенциалы с участием атома  $Y$ , но эти потенциалы определены другими операторами в уравнении (25) и возникают в рамках формализма многоэлектронного рассмотрения. Используемое одноэлектронное рассмотрение нуждается в более строгой детализации.

Указанные замечания не меняют общей положительной оценки диссертации. Диссертант проделал большой объем работы. Результаты, представленные в диссертации, опубликованы в реферируемых научных журналах, 5 из которых включены в список ВАК, и прошли апробацию на международных конференциях.

Автореферат диссертации полно и правильно отражает ее содержание.

На основании вышеизложенного можно заключить, что диссертация О.С. Алексеевой представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, которая соответствует всем требованиям и критериям, предъявленным к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, установленным в пункте 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденным постановлением Правительством Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, Алексеева Ольга Сергеевна, заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Заведующий кафедрой теоретической физики и астрономии  
Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена,  
доктор физико-математических наук, профессор



подпись *А.К. Беляев*  
удостоверяю « 16 СЕН 2014 » 200 г.  
Отдел персонала  
управления кадров и социальной работы



А.К. Беляев

Ведущий специалист  
отдела персонала  
Н.В. Горбатовская