

## ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертационную работу О.С. Алексеевой

"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

Диссертационная работа О.С. Алексеевой посвящена теоретическому исследованию и расчету оптических процессов в среде, состоящей из смеси резонансных атомных паров с буферным газом. В качестве резонансных паров в диссертации исследованы как тяжелые металлы второй побочной группы – кадмий и ртуть, так и метастабильные состояния тяжелых инертных газов – криптона и ксенона. В качестве буфера в первом случае выступают тяжелые инертные газы ксенон, криптон и аргон, а последнем - легкий инертный газ – гелий.

Актуальность этого направления исследований не вызывает сомнений, так как знание спектров поглощения и излучения атомов тяжелых металлов в смесях необходимо для их обнаружения оптическими методами, что особенно важно из-за их токсичности и экологической опасности. Что же касается смесей инертных газов, то они являются перспективными лазерными средами для вакуумного ультрафиолетового диапазона спектра. Помимо указанных выше практических применений конкретных результатов выполненных в диссертации расчетов следует отметить и методическую ценность проведенной работы.

Новизна выполненных в диссертации расчетов связана с учетом релятивистских эффектов в спектрах тяжелых атомов. Обычные методы расчета, основанные на приближенном учете связи между спиновым и орбитальным моментами электронов, в этом случае оказываются недостаточно точными. Уточненная волновая функция возбужденного состояния тяжелого атома должна быть построена как линейная комбинация нескольких резонансных состояний. Именно такая схема и была впервые реализована в диссертационной работе. В результате проведенных вычислений получены новые сведения о спектрах поглощения и излучения в газовых смесях, состоящих из паров металлов и инертных газов. Эти сведения трудно получить чисто экспериментальным путем, так как соответствующие молекулярные состояния слабо связаны и неустойчивы. Особенно интересными представляются расчеты спектров, формирующихся в смесях вблизи тех атомных переходов, которые в отсутствие столкновений с буферными частицами запрещены правилами отбора. В этом случае приближающаяся к активному атому частица вызывает смешивание атомных состояний различной симметрии, и запрет на излучательный переход снимается.

Полученные в диссертационной работе теоретические результаты, несомненно, вызовут интерес у экспериментаторов, занимающихся исследованием тех смесей, которые подробно изучены в диссертации. Развитая в диссертационной работе методика полуэмпирических расчетов будет широко использоваться, так как позволят извлекать из экспериментальных данных дополнительную информацию о системах, непосредственное исследование представляет значительные трудности.

Во **введении** обоснована актуальность темы, сформулирована цель работы, методы исследования, научная новизна, практическая ценность, основные положения, выносимые на защиту, а также кратко изложено содержание диссертации.

В **первой главе** проведено сравнение различных методов расчета энергетической структуры атомов, в том числе полуэмпирических методов, основанных на существенном использовании имеющихся экспериментальных данных, и расчетов из первых принципов, в которых экспериментальные данные о конкретных системах вообще не используются.

Обсуждаются также возможности получения сведений о термах непосредственно из экспериментальных данных, и делается вывод о необходимости развития полуэмпирических методов расчета атомной структуры для систем, исследуемых в диссертационной работе.

Подробно излагается систематика квазимолекулярных термов и вводятся необходимые обозначения. Приводятся экспериментальные данные, на которые опирается расчет, и даются расчетные формулы. Результаты расчета представлены в виде графиков потенциалов взаимодействия атома кадмия в первом возбужденном состоянии с атомами криптона и аргона для всех возможных значений проекции полного электронного момента на межъядерную ось.

В последнем разделе этой главы приведены данные относящиеся к взаимодействию атомов ртути с аргоном, криптоном и ксеноном.

Во **второй главе** диссертации рассмотрены радиационные процессы, индуцированные столкновениями атома кадмия, находящегося в метастабильном состоянии с проекцией полного электронного момента на межъядерную ось равной 2, с атомами аргона и криптона. Отмечается, что для промежуточных межъядерных расстояний результаты асимптотической теории снятия радиационного запрета недостаточно точны и обосновывается необходимость полуэмпирического подхода к расчету вероятностей радиационных квазимолекулярных переходов и радиационных ширин. В рамках развиваемого метода выписаны выражения для дипольного момента перехода и его ширины в зависимости от расстояния между активным атомом и буферной частицей. Результаты вычислений представлены в виде графиков зависимости вероятности радиационного перехода от межъядерного расстояния. На основе полученных результатов рассчитываются формы индуцированных столкновениями полос поглощения и излучения, примыкающих к запрещенному в изолированном атоме кадмия переходу между основным синглетным термом и возбужденным триплетным термом с полным моментом, равным двум. В дипольном приближении этот переход строго запрещен правилами отбора по полному моменту. Приводятся использованные при расчете формулы для крыла атомной линии в квазистатическом приближении и соответствующие спектры.

В **третьей главе** приведены результаты расчета радиационных времен жизни различных колебательных состояний молекул, образованных кадмием и ртутью в первом возбужденном состоянии, с аргоном, криптоном и ксеноном. Расчеты, представленные в этой главе, существенным образом опираются на результаты, полученные в первых двух главах. Результаты расчетов вероятностей переходов собраны в таблицы, которые охватывают ряд колебательных состояний верхнего и нижнего термов. Полученные результаты проанализированы, и сделан нетривиальный вывод о немонотонной зависимости радиационных времен жизни индивидуальных колебательных подуровней от уровня возбуждения. Результаты расчетов представлены в виде наглядных графиков термов, квадратов модулей колебательных волновых функций и вероятностей радиационных переходов.

**Четвертая глава** посвящена изложению результатов расчета спектров возбужденных атомов криптона и ксенона с атомами гелия, выступающего в данном случае в роли буферного газа. Указанные переходы относятся к спектральной области вакуумного ультрафиолета, широко используемой в ряде приложений от лазерной техники до водоочистки. Несмотря на значительные усилия, приложенные для теоретического расчета энергетической структуры гетероядерных квазимолекул и столкновительных комплексов, содержащих тяжелые инертные газы, из первых принципов, их результаты не обеспечили необходимой точности. В связи с этим представляются особенно важными проведенные в этой главе полуэмпирические расчеты, в которых для основного состояния используется многопараметрический потенциал, определенный на основании экспериментальных

данных по дифференциальному сечению рассеяния и коэффициенту диффузии. Рассчитанные спектры поглощения оказались в очень хорошем согласии с измеренными.

В **заключении** сформулированы основные научные результаты работы.

Диссертация написана хорошим языком, очень ясно и убедительно. Все основные особенности полученных результатов интерпретированы. Более подробного обсуждения заслуживают, на мой взгляд, следующие обстоятельства.

1. На рис. 3 и 4, приведенных на стр. 22 и 23, соответственно, очевидно, что все три квазимолекулярных терма с полными электронными моментами 0, 1 и 2 на которые атомный терм кадмия  $^3P_2$  расщепляется при приближении к нему атома того или иного инертного газа, пересекаются при определенном межъядерном расстоянии, примерно равном 9,5 атомных единиц. В тексте эта особенность никак не обсуждается.
2. На рис. 7 и 8, приведенных на стр. 34 и 35, соответственно, очевидно совпадение межъядерного расстояния, на котором меняет знак и обращается в ноль вероятность радиационного перехода, с расстоянием, на котором пересекаются термы, приведенные на верхней панели этого рисунка. Было бы желательно дать интерпретацию этих особенностей.
3. На стр. 52 при объяснении немоной зависимости радиационного времени жизни от номера колебательного состояния дана ссылка на рисунок 15, который хотя и соответствует высказанным качественным соображениям, не позволяет сделать количественный вывод о том, что зависимость действительно сменит знак.
4. На стр. 63 дана ссылка на работу [82], из которой взяты параметры потенциала основного состояния. При этом утверждается, что эти параметры получены из измерений коэффициента диффузии. В действительности, измерений одного только коэффициента диффузии недостаточно для получения таких подробных сведений о потенциале взаимодействия, и результаты, приведенные в [82] существенным образом опираются на измерения дифференциальных сечений рассеяния.
5. Больше деталей следовало бы привести в отношении способа калибровки, описанного на странице 67 как в отношении расстройки, так и в отношении амплитуды измеренных крыльев линий.

Высказанные выше замечания по тексту диссертации ни в коей мере не умаляют ее достоинств. Диссертационная работа О.С. Алексеевой является законченным научным исследованием, посвященным актуальной теме. Достоверность полученных в ней результатов не вызывает сомнений. Они, несомненно, будут широко использоваться.

Диссертация полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор О.С. Алексеева, заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Автореферат правильно и полно отражает содержание диссертации. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в ведущих журналах и доложены на конференциях.

ОФИЦИАЛЬНЫЙ ОППОНЕНТ  
Доктор физико-математических наук

  
Подпись Варшавский  
Удостоверяю  
Специалист ОК  
Университета ИТМО

