

ОТЗЫВ

научного руководителя на диссертационную работу Елфимова Сергея Викторовича «Многоканальная теория квантового дефекта для полярных молекул», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

Диссертация С. В. Елфимова посвящена разработке обобщенного подхода для расчета спектра и волновых функций, непроникающих ридберговских состояний полярной молекулы с учетом l -отвязывания для ридберговского электрона вследствие вращения остова, а также l -связывания из-за несферичности остовного дипольного потенциала.

Актуальность

Спектроскопия высоковозбужденных состояний представляет собой важную область атомной и молекулярной спектроскопии. К ним относятся состояния с энергиями близкими к порогу ионизации системы, известные как ридберговские состояния. Такие состояния допускают эффективное описание в одночастичном приближении, при котором один из электронов, так называемый ридберговский электрон, обладает большой энергией и движется в поле потенциала атомного или молекулярного остова. В поле остова доминирует монополярный кулоновский потенциал, тогда как вклад высших мультипольных компонент относительно невелик. По этой причине состояние ридберговского электрона близко к водородоподобному, отличие от которого характеризуется поправкой к главному квантовому числу ридберговского электрона, называемой квантовым дефектом. Анализ квантовых дефектов ридберговских состояний позволяет получить информацию о свойствах остова системы.

В диссертации получен ряд **новых результатов**.

1. Построена общая классификация ридберговских состояний полярных молекул.

2. Разработана техника сшивания волновых функций, получаемых в приближении Борна-Оппенгеймера и обратном приближении Борна-Оппенгеймера, пригодная как для неполярных, так и для полярных молекул. Проанализирована роль отвязывания углового момента ридберговского электрона от оси симметрии молекулярного остова. Обнаружено и исследовано резонансное поведение ридберговских термов, связанное с кратностью частот обращения ридберговского электрона, прецессии его орбиты и вращение молекулярного остова.
3. Выполнена оценка точности волновых функций. Эта оценка базируется на расчете нормы невязки, получаемой при подстановке волновой функции в молекулярное уравнение Шредингера. Произведена оптимизация точности волновой функции путем определения оптимального радиуса сшивания для функции, получаемых в приближение Борна-Оппенгеймера и обратном приближении Борна-Оппенгеймера.

Результаты, полученные автором, представляют **теоретическую и практическую** ценность для описания явлений, связанных с ридберговскими состояниями полярных молекул и в расчетах соответствующих молекулярных характеристик. В особенности, для тех задач, где важна точность волновой функции в дальней области, например для расчета сил осцилляторов и сечений туннельной ионизации.

Публикации правильно и достаточно полно отражают содержание диссертации.

Считаю, что диссертация Елфимова Сергея Викторовича «Многоканальная теория квантового дефекта для полярных молекул», по актуальности темы, новизне полученных результатов и их практической значимости соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор

Елфимов Сергей Викторович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

Кандидат физико-математических наук,

Д.л. Дор

Д.Л. Дорофеев

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Воронежский государственный университет» (ФГБОУ ВПО «ВГУ»)

Подпись *Дорофеева Д.Л.*

заверяю *Серебряк* _____
 должность

И.И. Резанцев и.ч. 16.04.2014
 подпись, расшифровка подписи

