

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

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

Спектроскопия высоковозбужденных, в частности ридберговских, состояний представляет собой важную область атомной и молекулярной спектроскопии. Высокая чувствительность ридберговских состояний к внешнему электрическому полю и их аномально сильные дальнедействующие взаимодействия позволяет использовать их в квантовых компьютерах. Такие состояния адекватно описываются в одночастичном приближении, при котором электрон движется в поле потенциала атомного или молекулярного остова. Известно, что традиционные техники *ab initio* являются малоэффективными для расчета спектра и волновых функций высоковозбужденных состояний.

Актуальность темы исследования. Для теоретического описания ридберговских спектров полярных молекул необходим, в частности, учет воздействия на электрон постоянного дипольного момента остова. До последнего времени соответствующие теоретические исследования отсутствовали. Диссертация С.В.Елфимова частично устраняет этот пробел, что и определяет **актуальность темы исследования.**

Научная новизна диссертационной работы Елфимова С.В. заключается, в построении общей классификации ридберговских состояний полярных молекул на примере молекулы SO, включающая области справедливости приближения Борна-Оппенгеймера (BO), обратного приближения Борна-Оппенгеймера (IBO), промежуточную область и область исчезновения дипольного квантового дефекта. Произведены оценки энергетических границ указанных областей. В рамках многоканальной теории квантового дефекта (MQDT) разработана техника сшивания волновых функций, получаемых в приближениях BO и IBO для полярных молекул, на примере молекулы SO. Проанализирована значимость 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. Выполнена оценка точности волновых функций, получаемых методами MQDT. Это оценка базируется на расчете нормы невязки, получаемой при подстановке волновой функции в молекулярное уравнение Шредингера. На примере молекулы SO определен опти-

мальный радиус сшивания волновых функции ВО и ИВО, позволяющий на данном базисе минимизировать нормы невязки.

Оценивая диссертацию в целом, необходимо, прежде всего, отметить свободное владение Елфимовым С.В. нетривиальным математическим аппаратом многоканальной теории квантового дефекта. Кроме того, выполнена и физическая интерпретация результатов расчетов. Все это, безусловно свидетельствует о высокой физико-математической квалификации диссертанта.

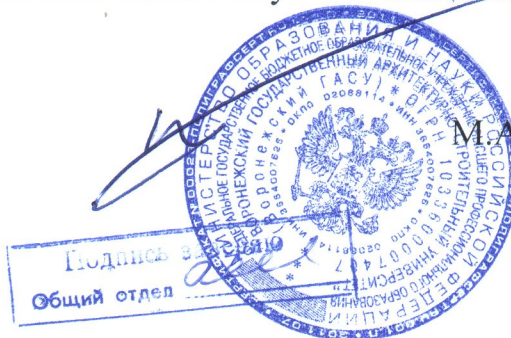
Вместе с тем, рецензируемая работа не свободна от **недостатков**, связанных, в основном, с ограниченностью физического базиса исследования. В этой связи, можно сформулировать следующие **замечания**:

1. Разделение состояний на проникающие и непроникающие лишь по значению орбитального квантового числа ридберговского электрона, основано на предположении, нуждающемся в обосновании более подробном обосновании.
2. Не исследована сходимость разложения (1.13) модифицированных сферических гармоник.
3. Все выводы сделаны на основе исследования лишь одной физической системы.

Указанные недостатки могут быть устранены в ходе дальнейших исследований и не влияют на в целом положительную оценку квалификационной работы.

Выводы и положения диссертационной работы убедительно аргументированы в рамках исследованной модели. Основные материалы, вошедшие в диссертацию, опубликованы в международных высокорейтинговых журналах, которые известны объективным и беспристрастным рецензированием. Автореферат диссертации полностью отражает ее содержание. Диссертация Елфимова С.В. представляет научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным положением о присуждении ученых степеней утвержденным Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 "О порядке присуждения ученых степеней". В связи с этим считаю, что Елфимова С.В. заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

К.ф.-м.н., доц.



М.А. Преображенский
10.06.2014