

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

Исследование высоко возбужденных электронных состояний представляет собой важную область современной молекулярной спектроскопии. Прецизионное описание молекулярных ридберговских состояний имеет исключительное значение для интерпретации спектров разреженной межзвездной среды, где, в отсутствие столкновений, значения главного квантового числа могут достигать нескольких сотен. Высокая чувствительность ридберговских состояний к внешнему электрическому полю и их аномально сильные дальнедействующие взаимодействия важны для осуществления новых методов вычислений реализуемых в так называемых квантовых компьютерах. Особую группу ридберговских состояний образуют состояния с высокими значениями орбитального момента электрона, волновые функции которых слабо очень слабо взаимодействуют с волновыми функциями электронов положительно заряженного остова. Данные ридберговские состояния характеризуются незначительными величинами квантового дефекта и аномально высокими значениями радиационных времен жизни. Изучаемые в работе молекулы оксиды серы и его катиона наблюдаются в межзвездных облаках, а также тропосфере Земли и Юпитера являясь важным звеном атмосферных физико-химических процессов. Традиционные техники квантово-механических многоэлектронных расчетов оказываются, как известно, неэффективными для описания энергий и волновых функций высоковозбужденных состояний. Таким образом, **актуальность** темы исследования выполненной в диссертационной работе Елфимова С.В. не вызывает у меня сомнений.

Научная новизна диссертационной работы Елфимова С.В. заключается, прежде всего, в создании общей классификации ридберговских состояний полярных молекул на основе аналитических асимптотических выражений, полученных автором в рамках так называемого прямого и обратного

приближения Борна-Оппенгеймера. На примере молекулы SO диссертантом выполнены оценки влияния эффекта ω -удвоения состояний остова на ридберговский электрон. Обнаружено и исследовано резонансное поведение ридберговских термов, связанное с кратностью частот обращения ридберговского электрона, прецессии его орбиты и вращения молекулярного остова. Впервые показано, что вклад магнитного диполь-дипольного взаимодействия в квантовый дефект пренебрежимо мал. Кроме того, путем расчета нормы невязки, получаемой при подстановке волновой функции в молекулярное уравнение Шредингера, впервые выполнена оценка точности волновых функций, получаемых методами многоканальной теории квантового дефекта. Произведена оптимизация точности волновой функции путем поиска оптимального радиуса сшивания функций прямого и обратного приближения Борна-Оппенгеймера.

Диссертация Елфимова С.В. состоит из введения, обзора литературы, 3 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 95 страниц, из них 85 страницы текста, включая 35 рисунков. Библиография включает 101 наименование. Диссертация изложена весьма лаконично, но достаточно информативно для беспрепятственного понимания сути работы.

В первой главе дан обзор ридберговских состояний полярных молекул на основе прямого приближения Борна-Оппенгеймера на примере молекулы SO. Получены асимптотические выражения для значения квантового дефекта и произведен сравнительный анализ величин квантовых дефектов, получаемых из асимптотических выражений и с помощью процедуры диагонализации.

Во второй главе представлена классификация ридберговских состояний полярных молекул на основе обратного приближения Борна-Оппенгеймера. Даны оценки для влияния ω -удвоения остовных состояний на динамику ридберговского электрона.

В третьей главе разработан обобщенный метод многоканальной теории квантового дефекта для расчета энергий и волновых функций непроникающих ридберговских состояний полярной двухатомной молекулы с учетом эффекта l -отвязывания электрона вследствие вращения остова, а также l -связывания из-за нарушения сферичности дипольного потенциала.

Разумеется, сделанные замечания носят исключительно рекомендательно-дискуссионный характер и ни в коей мере не влияют на высокую оценку диссертационной работы.

Диссертация Елфимова С.В. представляет научно-квалификационную работу, соответствующую критериям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, установленным п.9 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённым постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, в которой решена задача прецизионного описания энергетических свойств ридберговских состояний полярных двухатомных молекул в рамках многоканальной теории квантового дефекта.

Все выводы и положения диссертационной работы убедительно аргументированы. Основные материалы, вошедшие в диссертацию, опубликованы в международных высокорейтинговых журналах, которые известны объективным и беспристрастным рецензированием. Автореферат диссертации полностью отражает ее содержание. У меня нет никаких сомнений, что Елфимова С.В. заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования "Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова", Химический факультет

И.о. зав. кафедры лазерной химии
доктор физ.-мат. наук

 Столяров А.В.
2.06.2014

Декан Химического факультета МГУ
академик РАН, профессор

 Лунин В.В.



119991, Москва, ГСП-1, Ленинские Горы, д. 1, стр. 3

avstol@phys.chem.msu.ru; +7-495-939-28-25;