

УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор – проректор по научной работе
Московского физико-технического института,
д-р техн. наук, профессор
Горшков О.А.



« 21 » май 2014 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации 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 методов расчета спектра и волновых функций ридберговских состояний полярных двухатомных молекул.

Актуальность

Спектроскопия высоковозбужденных состояний представляет собой важную область атомной и молекулярной спектроскопии. Соответствующие спектроскопические данные необходимы для физики и химии плазмы, интерпретации спектров астрономических объектов. Известно, что традиционные техники *ab initio* являются малоэффективными для расчета спектра и волновых функций высоковозбужденных состояний. Особой группой

высоковозбужденных состояний являются ридберговские состояния. Среди них выделяют состояния с большими значениями орбитального момента ридберговского электрона. Волновые функции таких электронов слабо перекрываются с волновыми функциями остовных электронов, поэтому эти состояния принято называть непроникающими. Спектры непроникающих ридберговских состояний представляют существенный интерес для прецизионной спектроскопии, так как их интерпретация позволяет определять с высокой точностью свойства атомного или молекулярного остова, слабо возмущенные взаимодействием с ридберговским электроном.

Для теоретического описания ридберговских спектров полярных молекул необходим учет воздействия на ридберговский электрон постоянного дипольного момента остова. До последнего времени соответствующие теоретические исследования отсутствовали. Диссертация С.В.Елфимова частично устраняет этот пробел, поэтому ее тему следует признать актуальной.

В диссертации получен ряд **новых результатов**.

1. Построена общая классификация ридберговских состояний полярных молекул на примере молекулы SO, содержащая области, в которых реализуются приближение Борна-Оппенгеймера, обратное приближение Борна-Оппенгеймера, промежуточная область и область исчезновения дипольного квантового дефекта. Произведена оценка границ указанных областей.

2. Разработана техника сшивания волновых функций, получаемых в прямом и обратном приближениях Борна-Оппенгеймера для полярных молекул. 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 вращения молекулярного остова

3. Выполнена оценка точности волновых функций. Это 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.

Результаты, полученные автором, представляют **практическую** ценность для теоретического описания явлений, связанных с ридберговскими состояниями полярных молекул и расчетов соответствующих молекулярных характеристик. Например, в тех случаях, когда важна точность волновой функции в дальней области: при расчете сил осцилляторов и сечений туннельной ионизации. Вместе с тем, расчеты спектра и волновых функций высоковозбужденных состояний оксида серы SO представляют интерес для ряда плазмохимических и астрофизических задач.

По диссертации можно сделать следующие **замечания**:

1. Автор учитывает только состояния с орбитальным моментом, отличным от нуля (квантовый дефект определяется только дипольным потенциалом остова), пренебрегая вкладом s-состояний, для которых квантовый дефект максимален, что является некорректным ввиду значительного вклада контактного взаимодействия.
2. В диссертации отсутствуют сравнения с экспериментальными данными, что не позволяет проверить точность проведенных расчетов.
3. Результаты получены только для одной молекулы SO, причем не приводятся аргументы в пользу выбора именно этой молекулы. Отсутствуют расчеты для других двухатомных молекул, что позволило бы продемонстрировать эффективность и корректность метода расчета.

Сделанные замечания не касаются основных результатов, полученных в диссертационной работе и выносимых на защиту. Стилистически текст диссертации хорошо и понятно написан, снабжен достаточным количеством таблиц. Полученные в ней результаты имеют важное научное и практическое значение. Они достаточно полно опубликованы в реферируемых научных журналах и доложены на российских и международных конференциях. Автор

представляется вполне сформировавшимся ученым, способным решать сложные теоретические задачи современными методами исследования.

Автореферат и публикации правильно и достаточно полно отражают содержание диссертации.

Считаем, что диссертационная работа С.В. Елфимова «Многоканальная теория квантового дефекта для полярных молекул» соответствует всем требованиям, предъявляемым Положением о присуждении ученых степеней (утверждено постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842) к работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор - заслуживает ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

Отзыв рассмотрен и одобрен на заседании научно-методического совета кафедры теоретической физики Московского физико-технического института 25 апреля 2014 г.

Зав. кафедрой теоретической физики МФТИ

Д.ф.-м.н., профессор

Белоусов Ю.М.

Профессор кафедры теоретической физики МФТИ

Д.ф.-м.н., профессор

Крайнов В.П.