

ОТЗЫВ

о диссертации Елены Александровны Пазюк

«Спектроскопические модели для лазерного синтеза и контроля ультрахолодных ансамблей димеров щелочных металлов»,

представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

Получение ультрахолодных атомов и молекул является одним из ведущих направлений современной физической химии, поскольку позволяет проводить прецизионные исследования взаимодействия атомов и молекул друг с другом, а также с внешними электромагнитными полями. Ультрахолодные атомно-молекулярные ансамбли уже нашли широкое применение в современной высокоточной метрологии. В научной литературе активно обсуждаются возможности использования подобных ансамблей как для уточнения значений известных мировых постоянных, так и для обнаружения их возможной зависимости от времени. Опубликовано большое число работ по применению ультрахолодных атомно-молекулярных ансамблей в квантовой информатике. Несомненно астрохимическое значение лабораторных исследований ультрахолодных молекулярных ансамблей. Поэтому тема диссертации Е.А.Пазюк чрезвычайно актуальна.

Отличительной чертой работ автора, лежащих в основе диссертации, является обращение к исследованию именно молекулярных ансамблей, в то время как в подавляющем большинстве публикаций в мировой научной литературе рассматриваются атомные ансамбли. Это обусловлено принципиальными усложнениями молекулярных ансамблей по сравнению с атомными. Существенное продвижение в понимании строения и свойств ультрахолодных ансамблей щелочных димеров, достигнутое Е.А.Пазюк, позволяет говорить о ее важном вкладе в формирование этого научного направления.

Диссертация хорошо структурирована. Она состоит из Введения, 6-ти основных глав, сводки основных результатов, раздела «Выводы», Приложения и Списка литературы.

Во Введении (Глава 1) описаны основные методы, экспериментально используемые для получения ансамблей ультрахолодных молекул, теоретические модели, разработанные для прецизионного описания структуры щелочных димеров, формулируются цели диссертационной работы, положения, выносимые на защиту, теоретическая и практическая значимость исследования.

В Главе 2 рассматриваются энергетические и радиационные свойства электронно-возбужденных состояний димеров щелочных металлов. Строится разумный феноменологический гамильтониан вращательного движения и спин-орбитального взаимодействия. Использование феноменологических параметров неизбежно, к сожалению, для достижения поставленной в диссертации цели: описание существующих экспериментальных данных и предсказание новых с той высокой точностью, которая в настоящее время в экспериментах достигнута. В этой же главе приводятся диагональные и недиагональные матричные элементы операторов, определяющих матрицу потенциальной энергии, и матричные элементы, определяющие вероятности разрешенных (электрических дипольных) радиационных переходов.

В Главе 3 ставятся прямая и обратная спектральные задачи в методе связанных колебательных каналов. Справедливо отмечается неоднозначность решения обратной задачи: определение параметров теоретической модели из экспериментально измеряемых положений и интенсивностей ровибронных спектральных линий. Обсуждаются современные модификации классического потенциала Морзе, моделирующего межатомное взаимодействие. В качестве примера приводятся результаты расчетов положений и интенсивностей ровибронных линий молекул $^{23}\text{Na}^{85}\text{Rb}$ и $^{23}\text{Na}^{87}\text{Rb}$. Для этих молекул экспериментально измерены спектры вплоть до 76-го колебательного состояния, лежащего ниже диссоциационной границы на 0.15% потенциала диссоциации. Решение обратной задачи для экспериментальной точности 0.003 см^{-1} позволило получить значения 16-ти эмпирических параметров теоретической модели. Типичное число

эмпирических параметров составляет несколько десятков. Учитывая нелинейность задачи, понятно, что столь сложную задачу оптимизации неразумно ставить, даже с учетом возможностей современных компьютеров, если не использовать какую-либо дополнительную информацию. Такой дополнительной информацией является, в частности, известное поведение спин-орбитального взаимодействия и радиальных матричных элементов при больших и малых межъядерных расстояниях, теорема Гельмана-Фейнмана и др. Тем не менее, можно лишь догадываться о гигантских усилиях, затраченных на решение подобных задач.

В Главе 4 проводится анализ низколежащих синглет-триплетных комплексов конкретных димеров щелочных металлов. Вновь обращает на себя внимание огромный объем полученной информации, например, идентификация 2311 линий молекулы NaRb, анализ 3400 ровибронных уровней КСs и др. Графики и таблицы, представленные в этой главе, весьма информативны.

Глава 5 посвящена анализу неадиабатических колебательных волновых функций. Новым и принципиально важным следует считать вывод о неприменимости в данном случае одного из важнейших результатов теории Штурма для классической задачи Штурма-Лиувилля о связи числа узлов собственной функции с порядковым номером этой функции. Причина этого – многоканальность рассматриваемой колебательной задачи, которая подробно описана в данной главе.

Рассмотрению радиационных характеристик возбужденных электронных состояний посвящена Глава 6. Рассчитанные и экспериментально измеренные времена жизни состояния $C^1\Sigma^+$, в зависимости от колебательного квантового числа, для молекулы NaRb (Рис.6.3) качественно согласуются друг с другом, хотя расхождение является довольно заметным, особенно при малых колебательных числах. Подобным же образом ведут себя рассчитанные и экспериментально измеренные времена жизни других димеров.

Применению полученных данных к моделированию 2-х ступенчатых циклов лазерной конверсии посвящена Глава 7. Изложенные здесь

результаты являются, фактически, одним из возможных вариантов достижения цели, поставленной в диссертационной работе: оптимизация условий получения ультрахолодных молекулярных ансамблей.

В Главах 8 и 9 автором четко и ясно сформулированы основные результаты и выводы диссертации.

Дополнительная численная информация, не вошедшая в основной текст, приведена в Приложении.

Оценивая диссертацию в целом, необходимо, прежде всего, отметить огромный объем выполненных исследований. Опубликованные автором диссертации статьи фактически определяют современный уровень научных знаний, касающихся димеров щелочных металлов. Используемый в диссертации математический аппарат свидетельствует о высокой квалификации автора. Очень хорошее впечатление оставляет тот, не часто встречающийся факт, что в диссертации много место уделено качественной интерпретации как полученным вычислительным данным, так и экспериментальной информации.

Автореферат диссертации полностью отражает ее содержание.

Основные материалы, вошедшие в диссертацию, опубликованы в международных высокорейтинговых журналах. Эти журналы известны объективным и беспристрастным рецензированием. Поэтому в диссертации трудно найти недостатки, которые, тем не менее, следуя установившейся традиции, должны быть оппонентом обнаружены. В качестве такого недостатка можно указать на не полное согласие рассчитанных и экспериментально измеренных значений времен жизни, приведенных в Главе 6. К недостаткам изложения можно отнести отсутствие пояснения обозначений в некоторых формулах. Например, в уравнении (2.5) не определен оператор \hat{a}_i . В Главе 5 используются термины «adiaбатический» и «неadiaбатический». Поскольку лингвистически эти термины – синонимы, желательно было бы указать, какое различие между этими терминами имеет в виду автор.

Разумеется, отмеченные недостатки ни в коей мере не влияют на исключительно высокую оценку диссертационной работы. Диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным п. 7 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённым постановлением Правительства Российской Федерации от 30 января 2002 г. № 74 (в редакции постановления Правительства Российской Федерации от 20 июня 2011 г. № 475), в которой решена научная проблема: прецизионная теория димеров щелочных металлов.

У меня нет ни малейших сомнений, что автор диссертации, Е.А Пазюк, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Официальный оппонент

доктор физ.-мат. наук, проф.



Зон Б.А.

04.04.2014

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Воронежский государственный университет» (ФГБОУ ВПО «ВГУ»)	
Подпись:	<i>Зон Б.А.</i>
Засеял:	<i>Фрунзева О.С.</i>
подпись, расшифровка подписи	должность



