

ОТЗЫВ на автореферат диссертации Финенко Артёма Андреевича
“Моделирование инфракрасных спектров столкновительно-индуцированного поглощения методом классических траекторий”, представленной на соискание
ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Диссертационная работа Финенко Артёма Андреевича посвящена развитию технологий построения "из первых принципов" поверхностей потенциальной энергии и индуцированного дипольного момента слабосвязанных молекулярных комплексов, предназначенных для моделирования спектров индуцированного поглощения методом классических траекторий. Исследование спектральных свойств бимолекулярных образований в плотных газовых смесях являются весьма актуальной задачей современной молекулярной спектроскопии. Особое значение работе А.А. Финенко придает важность учета столкновительно-индуцированных спектров в задачах моделирования радиационных свойств атмосфер астрофизических объектов. С теоретической точки зрения сложность прогнозирования проявлений межмолекулярных взаимодействий связана с континуальностью спектра бимолекулярных состояний. Автором диссертации рассмотрен подход с применением метода классических траекторий для моделирования ансамбля молекулярных пар. Для количественного прогнозирования индуцированного спектра необходима информация о поверхностях энергии межмолекулярного взаимодействия и дипольного момента в широких диапазонах расстояний между молекулами и их всевозможных взаимных ориентациях. В работе развиты вычислительные техники получения гладких аппроксимаций сложных поверхностей энергии и диполя, использующие симметрию рассматриваемых мономеров. Для подробно анализируемого случая пары молекул симметрии T_d и $D_{\infty h}$ представлен математический аппарат формирования функциональной базисной системы, зависящей от межмолекулярных вращательных координат, а также впервые предложено использование квадратур Соболева для эффективного расчета параметров предлагаемого представления. В рамках задачи построения аппроксимаций характеристик слабосвязанных пар диссертантом рассмотрены алгоритмы машинного обучения, прежде всего на основе нейронных сетей. Развиты подходы к созданию набора признаков – значений перестановочно-

инвариантных многочленов, позволяющих заложить в машинно-обучаемую модель трансляционные, вращательные и перестановочные симметрии без модификации данных, используемых для обучения. Продемонстрирована высокая эффективность предлагаемого представления в сравнении с популярными машинно-обучаемыми моделями для аппроксимации многомерной поверхности потенциальной энергии.

Я полагаю, что диссертационная работа “Моделирование инфракрасных спектров столкновительно-индуцированного поглощения методом классических траекторий” соответствует критериям, определенным пп. 2.1-2.5 “Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова”, а ее автор, Финенко Артём Андреевич, достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Доктор физико-математических наук по специальности 02.00.17 – Математическая и квантовая химия, доцент, главный научный сотрудник Кафедры лазерной химии химического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова

А /

Зайцевский Андрей Вениаминович

23.11.2023

Почтовый адрес места работы: 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, ГСП-1, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, химический факультет

Тел:

Email:

Личную подпись Зайцевский
ЗАВЕРЯЮ;
Зам. Нач. отдела делопроизводства
химического факультета МГУ

Ирина Т.А.

Государственного университета имени М.В. Ломоносова