

ОТЗЫВ на автореферат диссертации
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
Финенко Артема Андреевича
на тему: «**Моделирование инфракрасных спектров
столкновительно-индуцированного поглощения методом
классических траекторий**»
по специальности 1.4.4. Физическая химия

Диссертационная работа Финенко А. А. посвящена развитию методов высокоточной аппроксимации поверхностей потенциальной энергии (ПЭ) и индуцированного дипольного момента (ИДМ) слабосвязанных молекулярных комплексов и их применению в расчетах спектров столкновительно-индуцированного поглощения, проводимых в рамках классического формализма.

Актуальность подобных исследований обусловлена тем, что их результаты вносят важный вклад в решение целого ряда практически-важных проблем, в первую очередь, связанных с надежным предсказанием радиационных свойств атмосфер астрофизических объектов и построением климатических моделей.

В рамках работы удалось достигнуть существенного прогресса в области аналитического представления поверхностей ПЭ и ИДМ. Показано, что применение квадратур Соболева в сочетании с приведенными по симметрии угловыми функциями позволяет сформулировать эффективную вычислительную схему для построения гладких модельных поверхностей, обладающих правильной асимптотикой в широком диапазоне межмолекулярных расстояний

Другим инновационным подходом, развитым в работе, является применение машинно-обучаемых моделей поверхностей ПЭ и ИДМ. Развитый подход (PIP-NN) использует перестановочно-инвариантные многочлены в качестве промежуточного представления аппроксимируемых величин, учитывая при этом как межмолекулярные, так и внутримолекулярные степени свободы.

Разработанные методы успешно опробованы на примере слабосвязанных молекулярных систем $\text{CH}_4\text{-N}_2$ и $\text{N}_2\text{-Ar}$, для которых в работе были проведены высокоуровневые неэмпирические квантовохимические расчеты рассматриваемых свойств, а затем с использованием полученных аппроксимаций методом классических траекторий рассчитаны спектры столкновительно-индуцированного поглощения. Такого рода исследования проведены впервые. Результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными и

позволяют, в частности, сделать некоторые важные выводы относительно свойств атмосферы планеты Титан.

Научная и практическая значимость работы заключается в том, что разработанные методы являются важным шагом на пути моделирования сложного физического явления – столкновительно-индуцированного поглощения, играющего важную роль в радиационном переносе излучения в планетных атмосферах и формировании климата планет. Полученные в работе результаты были использованы для моделирования светимости атмосферы Титана, а также были включены в международную базу данных HITRAN.

Материалы, изложенные в диссертации, хорошо опубликованы. По теме работы имеются 4 статьи в высокорейтинговых журналах, входящих в реферативные базы данных Web of Science, Scopus, RSCI. Результаты были представлены в большом числе докладов на всероссийских и международных конференциях.

На основе автореферата можно заключить, что диссертация по своей актуальности, научной и практической значимости и новизне в полной мере 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 Артем Андреевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Кандидат химических наук, старший научный сотрудник Лаборатории квантовохимического моделирования молекулярных систем ФГБОУ ВО «Иркутский государственный университет»

Скитневская Анна Дмитриевна

15 ноября 2023 г.

Контактные данные:

Телефон:

E-mail:

Специальность, по которой защищена кандидатская диссертация: 02.00.04 – физическая химия

Адрес места работы:

664003, г. Иркутск, ул. К. Маркса, д. 1, ФГБОУ ВО «Иркутский государственный университет», Лаборатория квантовохимического моделирования молекулярных систем

Телефон: +7 (3952) 521211

«15» ноября 2023 г.

Доктор химических наук, профессор, ведущий научный сотрудник Лаборатории квантовохимического моделирования молекулярных систем ФГБОУ ВО «Иркутский государственный университет»

Трофимов Александр Борисович

15 ноября 2023 г.

Контактные данные:

Телефон:

E-mail:

Специальность, по которой защищена докторская диссертация: 02.00.04 – физическая химия

Адрес места работы:

664003, г. Иркутск, ул. К. Маркса, д. 1, ФГБОУ ВО «Иркутский государственный университет», Лаборатория квантовохимического моделирования молекулярных систем

Телефон: +7 (3952) 521211

