

**Заключение диссертационного совета МГУ.014.3(МГУ.02.04)
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук**

Решение диссертационного совета от 25.11.2022 г. №140.

О присуждении Мешкову Владимиру Владимировичу, гражданину России, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Моделирование высокоточных межатомных потенциалов на основе спектроскопических и квантовохимических данных» по специальности 1.4.4. «Физическая химия» принята к защите диссертационным советом 07.10.2022, протокол №127.

Соискатель Мешков Владимир Владимирович, 1979 года рождения в 2008 году окончил очную аспирантуру химического факультета химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Соискатель работает научным сотрудником на кафедре лазерной химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Диссертация выполнена на кафедре лазерной химии химического факультета.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, Столяров Андрей Владиславович.

Официальные оппоненты:

1. доктор физико-математических наук, Козлов Михаил Геннадьевич, Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», отделение нейтронных исс;

2. доктор физико-математических наук, доцент, Чернов Владислав Евгеньевич, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ВГУ»), кафедра математической физики и информационных технологий;

3. доктор физико-математических наук, Казаков Константин Вячеславович, Институт физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН.

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 21 опубликованную работу, в том числе 7 работ по теме диссертации, из них 7 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.4 – «Физическая химия»: Наиболее значимые из них:

1. Meshkov V. V., Stolyarov A. V., Le Roy R. J. Adaptive analytical mapping procedure for efficiently solving the radial Schrodinger equation // *Physical Review A*. — 2008. — Т. 78, No 5. — С. 052510. — (импакт-фактор WoS — 2,971).

2. Meshkov V. V., Stolyarov A. V., Le Roy R. J. Rapid, accurate calculation of the s-wave scattering length // *Journal of Chemical Physics*. — 2011. — Т. 135, No 15. — С. 154108. — (импакт-фактор WoS — 4,304).

3. Busevica L., Klincare I., Nikolayeva O., Tamanis M., Ferber R., Meshkov V., Pazyuk E., Stolyarov A. Fourier transform spectroscopy and direct potential fit of a shelflike state: Application to E(4)1Σ⁺ KCs // *Journal of Chemical Physics*. — 2011. — Т. 134, No 10. — С. 104307. — (импакт-фактор WoS — 4,304).

4. Zuters V., Docenko O., Tamanis M., Ferber R., Meshkov V., Pazyuk E., Stolyarov A. Spectroscopic studies of the (4)1Σ⁺ state of RbCs and modeling of the optical cycle for ultracold X1Σ⁺ (= 0, = 0) molecule production // *Physical Review A - Atomic, Molecular, and Optical Physics*. — 2013. — Т. 87, No 2. — С. 022504. — (импакт-фактор WoS — 2,971).

5. Meshkov V. V., Stolyarov A. V., Heaven M. C., Carl H., LeRoy R. J. Directpotential-fit analyses yield improved empirical potentials for the ground X1Σ⁺ state of Be₂ // *Journal of Chemical Physics*. — 2014. — Т. 140, No 6. — С. 064315. — (импакт-фактор WoS — 4,304).

6. Терашкевич В. А., Мешков В. В., Пазюк Е. А., Столяров А. В. Неэмпирическое моделирование транспортных свойств в лазерных средах Rb-CH₄ и Cs-CH₄ // *Журнал физической химии*. — 2018. — Т. 92, No 4. — С. 633–639. — (импакт-фактор РИНЦ — 0,856).

7. Krumins V., Kruzins A., Tamanis M., Ferber R., Meshkov V. V., Pazyuk E. A., Stolyarov A. V., Pashov A. Observation and modeling of bound-free transitions to the X1Σ⁺ and a3Σ⁺ states of KCs // *The Journal of Chemical Physics*. — 2022. — Т. 156, No 11. — С. 114305. — (импакт-фактор WoS — 4,304).

На диссертацию и автореферат поступило 8 дополнительных отзывов, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области молекулярной спектроскопии и квантовой химии, а также большим количеством научных публикаций в соответствующих областях исследований.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой усовершенствованы методы построения высокоточных потенциалов межатомного взаимодействия. С помощью новых методов были получены: потенциалы состояния $(4)1\Sigma^+$ молекул KCs и RbCs, потенциал основного состояния димера бериллия (Be_2), потенциальные кривые основного ($X1\Sigma^+$) и низшего триплетного ($a3\Sigma^+$) состояний молекулы KCs, а также потенциалы и транспортные свойства для систем Cs–CH₄ и Rb–CH₄.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Предложенная аналитическая модель для аппроксимации межатомных потенциалов позволяет одновременно воспроизводить, как спектры высокого разрешения в пределах точности измерений, так и данные квантово-химических расчетов на уровне погрешности расчета.
2. Аналитическое преобразование радиальной координаты позволяет существенно ускорить и упростить процедуру решения колебательно-вращательного уравнения Шрёдингера, а также итерационного поиска параметров модельной функции, аппроксимирующей межатомный потенциал.

На заседании 25.11.2022 года диссертационный совет принял решение присудить Мешкову Владимиру Владимировичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них доктора(ов) наук по специальности 1.4.4. «Физическая химия» – 7 человек(а), участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали: «за» – 17, «против» – 0, «недействительных бюллетеней» – 0.

Председатель совета,
д.х.н., доц.

Горюнков А. А.

Ученый секретарь совета,
к.х.н., доц.

Шилина М. И.