

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

Решение диссертационного совета от «15» декабря 2023 г. № 166

О присуждении Финенко Артёму Андреевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация: «Моделирование инфракрасных спектров столкновительно-индуцированного поглощения методом классических траекторий» по специальности 1.4.4 – «Физическая химия» (физико-математические науки) принята к защите диссертационным советом 29.09.2023, протокол № 156.

Соискатель Финенко Артём Андреевич 1995 года рождения в 2023 году окончил очную аспирантуру химического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Соискатель работает лаборантом в лаборатории квантовой фотодинамики кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

Диссертация выполнена в лаборатории квантовой фотодинамики кафедры физической химии химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова.

Научные руководители:

- кандидат физико-математических наук Петров Сергей Владимирович, старший научный сотрудник кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова;
- доктор физико-математических наук Вигасин Андрей Алексеевич, главный научный сотрудник лаборатории атмосферной спектроскопии Института физики атмосферы имени А.М. Обухова РАН.

Официальные оппоненты:

- Иванов Сергей Викторович, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт фотонных технологий РАН Федерального научно-исследовательского центра “Кристаллография и фотоника” РАН, лаборатория лазерной диагностики в экологии и биомедицине, ведущий научный сотрудник;

- Черепанов Виктор Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент, Физический факультет федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования “Национальный исследовательский Томский государственный университет”, заведующий кафедрой оптики и спектроскопии;
- Асфин Руслан Евгеньевич, кандидат физико-математических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Санкт-Петербургский государственный университет”, кафедра молекулярной спектроскопии, доцент
дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 9 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 4 работ, из них 4 статьи в международных рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI и рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.4 – «Физическая химия»:

1. Continuum absorption of millimeter waves in nitrogen / Serov E.A., Balashov A.A., Tretyakov M.Yu, Odintsova T.A., Koshelev M.A., Chistikov D.N., Finenko A.A., Lokshantov S.E., Petrov S.V., Vigin A.A. // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2019. – Vol. 242. – P. 106774-1 - 106774-9. (JIF WoS 2.468, 1 п.л., вклад соискателя составляет 60%)
2. Fitting potential energy and induced dipole surfaces of the van der Waals complex CH₄-N₂ using non-product quadrature grids / Finenko A.A., Chistikov D.N., Kalugina Y.N., Conway E.K., Gordon I.E. // Physical Chemistry Chemical Physics (Incorporating Faraday Transactions). – 2021. – Vol. 23, no. 34. – P. 18475-18494. (JIF WoS 3.945, 2 п.л., вклад соискателя составляет 60%)
3. The HITRAN2020 molecular spectroscopic database / Gordon I.E., Rothman L.S., Hargreaves R.J., Hashemi R., Karlovets E.V., Skinner F.M., Conway E.K., Hill C., Kochanov R.V., Tan Y., Wcisło P., Finenko A.A., Nelson K., Bernath P.F., Birk M., Boudon V., Campargue A., Chance K.V., Coustenis A., Drouin B.J., Flaud J.-M., Gamache R.R., Hodges J.T., Jacquemart D., Mlawer E.J., Nikitin A.V., Perevalov V.I., Rotger M., Tennyson J., Toon G.C., Tran H., Tyuterev V.G., Adkins E.M., Baker A., Barbe A., Canè E., Császár A.G., Dudaryonok A., Egorov O., Fleisher A.J., Fleurbaey

H., Foltynowicz A., Furtenbacher T., Harrison J.J., Hartmann J.-M., Horneman V.-M., Huang X., Karman T., Karns J., Kassi S., Kleiner I., Kofman V., Kwabia-Tchana F., Lavrentieva N.N., Lee T.J., Long D.A., Lukashevskaya A.A., Lyulin O.M., Makhnev V.Yu., Matt W., Massie S.T., Melosso M., Mikhailenko S.N., Mondelain D., Müller H.S. P., Naumenko O.V., Perrin A., Polyansky O.L., Raddaoui E., Raston P.L., Reed Z.D., Rey M., Richard C., Tóbiás R., Sadiek I., Schwenke D.W., Starikova E., Sung K., Tamassia F., Tashkun S.A., Vander Auwera J., Vasilenko I.A., Vigasin A.A., Villanueva G.L., Vispoel B., Wagner G., Yachmenev A., Yurchenko S.N. // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. – 2022. – Vol. 277. – P. 107949-1 - 107949-82. (JIF WoS 2.468, 6 п.л., вклад соискателя в раздел, посвященный столкновительно-индуцированному поглощению, составляет 70%)

4. Trajectory-based Simulation of Far-infrared Collision-induced Absorption Profiles of $\text{CH}_4\text{-N}_2$ for Modeling Titan's Atmosphere / Finenko A.A., Bézard B., Gordon I.E., Chistikov D N., Lokshtanov S.E., Petrov S.V., Vigasin A.A. // *Astrophysical Journal Supplement Series*. – 2022. – Vol. 258, no. 2. – P. 33-1 - 33-13. (JIF WoS 8.136, 1 п.л., вклад соискателя составляет 60%)

На диссертацию и автореферат поступило 5 дополнительных отзывов, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области физической химии, молекулярной спектроскопии и квантовой химии, а также наличием большого количества 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 автором развиваются методы построения высокоточных аппроксимаций поверхностей потенциальной энергии и индуцированного дипольного момента с целью их применения в расчетах спектров столкновительно-индуцированного поглощения: предложен математический аппарат формирования функциональной базисной системы, зависящей от межмолекулярных вращательных координат, для случая пары взаимодействующих молекул симметрии $T_d\text{-D}_{\infty h}$; предложен метод квадратур Соболева для получения параметров предлагаемого представления поверхностей потенциала и индуцированного диполя; развит подход с использованием

полносвязных нейронных сетей, использующий перестановочно-инвариантные многочлены.

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. Приведение по симметрии угловых функций в сочетании с квадратурными сетками типа Соболева соответствующей симметрии оказывается эффективным вычислительным подходом для построения поверхностей потенциальной энергии и индуцированного дипольного момента слабосвязанных комплексов в приближении жестких мономеров.
2. Машинно-обучаемые модели, использующие перестановочно-инвариантные многочлены в качестве промежуточного представления, позволяют с высокой точностью описать энергию и дипольный момент слабосвязанных систем в зависимости от внутренних степеней свободы мономеров и в широком диапазоне межмолекулярных расстояний, что делает возможным их использование в задаче моделирования индуцированного поглощения с позиций классического формализма.
3. Спектры индуцированного поглощения, рассчитанные методом классических траекторий в сочетании с комбинированной схемой десимметризации, позволяют с высокой точностью описать экспериментальные спектры светимости планетных атмосфер в дальней инфракрасной области.

На заседании 15.12.2023 диссертационный совет принял решение присудить Финенко А.А. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 6 докторов наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия» (физико-математические науки), участвовавших в заседании, из 21 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 16, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель диссертационного совета
д.х.н., доцент

Горюнков А.А.

Ученый секретарь диссертационного совета

к.х.н., доцент

Шилина М.И.

15.12.2023