

Отзыв на автореферат диссертации Чистикова Даниила Николаевича
«Квантовые и классические методы расчета
дипольно-запрещенных спектров малых молекул»
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.4.4 – физическая химия

При исследовании спектров высокого разрешения нередко возникают предположения о дипольно-запрещенной природе некоторых обнаруживаемых в них слабых полос. К сожалению, современные возможности количественной оценки интенсивностей таких переходов весьма ограничены, несмотря на существование общей теории этих процессов. С другой стороны, малоинтенсивные переходы могут возникать и по дипольному механизму в результате межмолекулярных взаимодействий, корректный учет которых тем более затруднителен. Все это существенно затрудняет интерпретацию экспериментальных результатов. Работа Д. Н. Чистикова представляет собой очень важный вклад в теоретическую спектроскопию, предлагая эффективные подходы к высокоточному расчету интенсивностей как магнитно-дипольных и квадрупольных переходов, так и столкновительно-индуцированных переходов для пар слабовзаимодействующих малых молекул и атомов. В связи с этим, работа Д. Н. Чистикова способствует решению важных практических задач, связанных со спектральной идентификацией состава газовых смесей и с описанием их взаимодействия с полем излучения, которые возникают в химии атмосферы и астрохимии, а дальнейшее развитие этой работы в сторону более сложных систем может быть полезно и для более традиционных областей химии.

В работе Д. Н. Чистикова решен, на самом деле, целый ряд важных задач. Во-первых, разработан эффективный алгоритм усреднения рассчитываемых квантово-механических величин по классическим траекториям, развитый для случаев как динамики несвязанных комплексов, так и их ограниченного движения в связанных состояниях. В рамках этого было дано удобное описание динамики комплексов в терминах гамильтонова формализма, были разработаны корректные подходы к усреднению по траекториям в фазовом пространстве и к расчету спектральных характеристик через преобразование Фурье автокорреляционных функций по траекториям. Во-вторых, были получены полезные выражения для расчета интенсивностей магнитных дипольных переходов между колебательно-вращательными состояниями линейных молекул. В-третьих, разработанный формализм был успешно

применен к реальным системам, что позволило продемонстрировать его надежность и предсказательность. Нельзя не отметить получение Д. Н. Чистиковым целого ряда полезных аналитических результатов, имеющих общее значение. Помимо актуальности, все эти результаты работы Д. Н. Чистикова характеризуются и исключительно высоким элементом новизны, находясь на передовом уровне теоретической спектроскопии.

Автореферат работы написан подробно и последовательно, освещая ключевые теоретические положения, лежащие в основе работы. Напрашивается лишь одно пожелание, связанное с представленными результатами: было бы полезно увидеть выводы о соотношении интенсивностей и, следовательно, значимости со спектроскопической точки зрения, магнитно-дипольных и квадрупольных переходов с одной стороны и столкновительно-индуцированных переходов с другой в зависимости от плотности и температуры соответствующих газовых смесей.

Это пожелание является, конечно, лишь частным, и общее впечатление от работы Д.Н. Чистикова является исключительно высоким. По своей актуальности, новизне, содержательности и практической значимости результаты этой работы бесспорно соответствуют критериям, определенным п.п. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», и таким образом Д.Н. Чистиков несомненно достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4- «Физическая химия».

д.ф.-м.н., доцент по специальности «физическая химия»,

профессор кафедры физической химии

химического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова

Иоффе Илья Нафтольевич

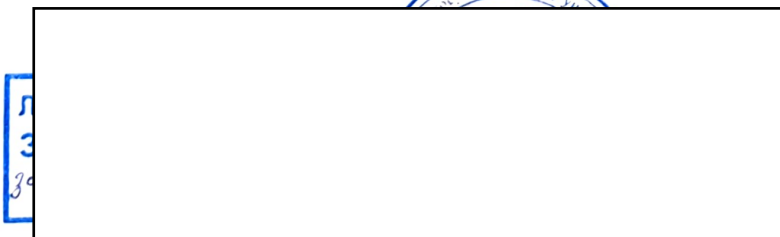
Москва, 119991, Ленинские горы д. 1, стр. 3, химический ф-т МГУ

тел. e-mail:



21.11.2023





Т.А.