

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Чистикова Даниила Николаевича «Квантовые и классические методы расчета дипольно-запрещенных спектров малых молекул», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

К спектрам поглощения молекул, обусловленным дипольно-запрещенными переходами, в настоящее время проявляется значительный научный интерес. В частности, спектры индуцированные давлением необходимы при исследовании плотных планетных атмосфер, таких как атмосферы Венеры и Титана, а также атмосфер ряда экзопланет. В атмосфере Земли спектры водяного пара, индуцированные давлением воздуха (так называемое континуальное поглощение), дают значительный вклад в энергетический баланс атмосферы и, таким образом, являются значимым климатообразующим фактором. Квадрупольные и магнитно-дипольные спектры молекул несут информацию о внутримолекулярном распределении зарядов и внутримолекулярной динамике.

Диссертационная работа Чистикова Д.Н. посвящена построению схемы расчета столкновительно-индуцированных спектров в рототрансляционной области с применением метода классических траекторий и теоретическому расчету спектров квадрупольного и магнитно-дипольного поглощения в линейных молекулах.

К наиболее важным результатам работы следует отнести разработку и апробацию методики расчета спектров столкновительно-индуцированного поглощения (СИП) методом классических траекторий. Предложенная методика реализована в виде оригинального программного продукта, позволяющего проводить серийные расчеты спектров СИП в широком интервале температур. Рассчитанные в настоящей работе в рамках разработанной методики спектры $\text{CO}_2\text{-Ar}$ и $\text{N}_2\text{-N}_2$ помещены в международную спектроскопическую базу данных HITRAN.

Следует отметить результаты по прямому теоретическому расчету интенсивностей линий полосы $\nu_2+\nu_3$ углекислого газа в магнитно-дипольном и квадрупольном поглощении. Результаты очень хорошо согласуются с экспериментом. Что касается квадрупольного поглощения, то соискатель значительно улучшил точность расчета, опубликованного в работе Yachmenev A. et al. J. Chem. Phys. 154 (2021) 211104. Соискателем теоретически показано, что вклад в магнитно-дипольный момент перехода в случае полосы $\nu_2+\nu_3$ углекислого газа от колебательного движения в разы превосходит вклад от вращательного движения.

Исходя из содержания автореферата, диссертация Чистикова Д.Н. является законченной научно-квалификационной работой, в которой изложены результаты, обладающие научной новизной и практической ценностью. Тематика работы соответствует паспорту специальности 1.4.4 - Физическая химия.

О проработанности тематики свидетельствует публикационная активность соискателя. Результаты диссертации опубликованы в 5 научных работах, вышедших в свет в высокорейтинговых научных журналах.

По содержанию автореферата напрашивается одно замечание. Что имел в виду соискатель, формулируя следующий результат: «5. С использованием формализма сферических тензоров впервые получены выражения для расчета интенсивности колебательно-вращательных спектров в магнитно-дипольном приближении для линейных многоатомных молекул»? В рамках полуэмпирического подхода эти выражения известны. Смотри, например, V.I. Perevalov et al. "Magnetic dipole and electric quadrupole absorption in carbon dioxide" JQSRT 259 (2021) 107408.

Диссертационная работа Чистикова Даниила Николаевича соответствует требованиям Положения о присуждении учёных степеней кандидата физико-математических наук, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова, а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Автор отзыва

ФИО: Перевалов Валерий Иннокентьевич

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Год присуждения ученой степени и научная специальность, по которой присуждена ученая степень: 1997, 01.04.05 - Оптика

Ученое звание: нет

Место работы (полное название организации в соответствии с Уставом, подразделение): ФГБУН Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук

Должность: главный научный сотрудник

Контактная информация: Тел.:

E-mail:

«10» ноября 2023 г.

/ В.И. Перевалов/

Подпись В.И. Перевалова за

Начальник отдела кадров И



Г.А. Фурсова