

ОТЗЫВ на автореферат диссертации
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
Чистикова Даниила Николаевича
на тему: «**Квантовые и классические методы расчета
дипольно-запрещенных спектров малых молекул**»
по специальности 1.4.4. Физическая химия

Диссертационная работа Чистикова Д.Н. посвящена развитию методов расчета характеристик переходов в спектрах молекул ИК диапазона, запрещенных дипольными правилами отбора. Актуальность подобных исследований обусловлена тем, что они связаны с фундаментальными вопросами взаимодействия молекул с электромагнитным полем, а также большим числом разнообразных приложений, в которых они востребованы, включая задачи климатического моделирования и астрохимии.

В работе использован метод классических траекторий для расчета спектров столкновительно-индуцированных переходов (СИП) систем N_2-N_2 и CO_2-Ar . Полученные результаты сопоставляются с данными эксперимента и квантовомеханического моделирования. Следует отметить высокую эффективность разработанного метода расчета, который, как видно из полученных результатов, не уступает по точности квантовомеханическим подходам, но значительно превосходит последние по скорости.

Важная часть работы посвящена магнитно-дипольному и квадрупольному спектрам. В ней проанализирована также роль вкладов вращательного и колебательного движений в магнитно-дипольные переходы. Проведенные в работе исследования колебательной полосы $\nu_2+\nu_3$ магнитно-дипольного спектра молекулы CO_2 вносят существенный вклад в понимание механизмов возбуждения принадлежащих спектру переходов.

Характеризуя работу в целом следует отметить, что она выполнена на самом высоком научном уровне. При этом следует подчеркнуть, что расчеты спектров СИП, а также спектров с магнитно-дипольным и квадрупольным механизмами возбуждения переходов, до сих пор являются крайне редкими. Кроме того, работа представляет собой замечательный пример успешного использования методов классической механики для решения задач физики молекул.

Научная и практическая значимость работы определяется тем, что в ней развит эффективный метод расчетов спектров СИП, который может быть использован в случае широкого круга задач, требующих для своего решения информации о соответствующих переходах. Рассчитанные спектры систем N_2-N_2 и CO_2-Ar помещены в международную спектроскопическую базу дан-

ных HITRAN. Проведенные в работе расчеты впервые количественно объясняют полосу поглощения $\nu_2+\nu_3$ молекулы CO_2 .

Материалы, изложенные в диссертации, хорошо опубликованы. По теме работы имеются 5 статей в высокорейтинговых журналах, входящих в реферативные базы данных Web of Science, Scopus, RSCI. Результаты также были представлены в 6 докладах на всероссийских и международных конференциях.

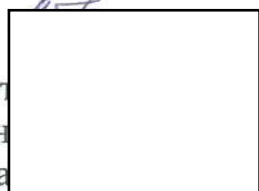
На основе автореферата можно заключить, что диссертация по своей актуальности, научной и практической значимости и новизне в полной мере соответствует критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а ее автор Чистиков Даниил Николаевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

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

Трофимов Александр Борисович

15 ноября 2023 г.

Контакт
Телефон
E-mail: а



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
E-mail:

