

**ОТЗЫВ официального оппонента**  
**о диссертации на соискание ученой степени**  
**кандидата физико-математических наук**  
**Мешкова Владимира Владимировича**  
**на тему: «Моделирование высокоточных межатомных потенциалов на**  
**основе спектроскопических и квантовохимических данных»**  
**по специальности 1.4.4 – «Физическая химия»**

В настоящее время идет быстрое развитие методов лазерной химии, для которой чрезвычайно важно знание адиабатических межатомных потенциалов со спектроскопической точностью (порядка единиц  $\text{см}^{-1}$  и выше). Эти потенциалы также нужны для молекулярной физики, физики сверхнизких температур и астрофизики. В тоже время, современные методы квантовой химии не дают требуемой точности. Поэтому необходимо развивать полуэмпирические подходы, когда наряду с теоретическими данными используются прецизионные экспериментальные данные о молекулярных спектрах. Тем самым, **актуальность темы диссертации не вызывает сомнений.**

Большинство имеющихся полуэмпирических моделей для межатомных потенциалов разрабатывались достаточно давно и не удовлетворяют современным требованиям по точности. В первую очередь это относится к асимптотикам потенциалов на малых и больших расстояниях, поскольку для этих областей обычно недостаточно экспериментальных данных. В диссертационной работе предлагается новый способ построения потенциалов, при котором для разных межатомных расстояний используются как теоретические, так и экспериментальные данные. Предложенный диссертантом способ построения потенциала гарантирует его гладкость во всей области определения, регулируемую гибкость и правильную асимптотику на больших расстояниях. С этой целью делается преобразование координат, переводящее полубесконечную область определения

потенциальной функции в конечную, после чего применяется разложение потенциала по полиномам Чебышева. Получаемые таким способом потенциалы имеют физически правильные асимптотики и точность, определяемую только точностью используемых экспериментальных и теоретических данных. Потенциалы такого качества отсутствуют в литературе, поэтому **проведенные В. В. Мешковым исследования являются новыми и важными**. В своей работе соискатель использует строгие математические методы, надежные спектроскопические данные и результаты наиболее точных современных квантовохимических расчетов. Все это **гарантирует надежность и достоверность полученных в диссертационной работе результатов**.

Основная часть работы состоит из трех глав. В первой главе описаны имеющиеся модели для двухатомных потенциалов, указаны их недостатки и предложена новая модель, которая и используется автором во всех последующих расчётах.

Вторая глава посвящена обсуждению методов решения радиального уравнения Шредингера и носит технический характер. Дело в том, что для построения высокоточных потенциалов необходимо проводить сложную многопараметрическую оптимизацию и на каждом шаге нужно решать радиальное уравнение. Для этого автор предложил замену переменных, при которой осцилляции волновой функции становятся более не менее равномерными, что позволяет использовать равномерную сетку с не очень большим числом узлов.

В третьей главе приведены все основные результаты работы. Первый параграф посвящен расчету потенциалов состояния  $E(4)^1\Sigma^+$  молекул  $KCs$  и  $RbCs$ . Эти молекулы представляют большой интерес для изучения квантовых газов при сверхнизких температурах. Из-за наличия псевдопересечения, потенциал состояния  $E(4)$  имеет «нестандартную» форму. Поэтому построение высокоточного потенциала для этого состояния представляет сложную задачу и дает возможность продемонстрировать преимущества

предложенного в работе метода. Во втором параграфе описан потенциал для димера бериллия. Эта система интересна, в первую очередь, для проверки точности современных квантовохимических методов. В третьем параграфе описано построение потенциалов нижнего синглетного и триплетного состояний молекулы KCs. Эти потенциалы особенно важны для лазерной химии. В последнем параграфе описаны потенциалы слабосвязанных систем Cs-CH<sub>4</sub> и Rb-CH<sub>4</sub>.

Из текста диссертации можно сделать вывод, что автор проделал большую работу и провел исследования достаточно разных систем. Во всех этих случаях, предложенный соискателем метод, оказался эффективным. Все построенные потенциалы имеют высокую точность как в области минимума, так и на больших и малых расстояниях. Это показывает, что предложенный метод применим к разным атомам и может использоваться во многих областях физики и химии.

Диссертация производит хорошее впечатление и написана отличным языком. Изложение строгое и логичное. Список литературы достаточно полон и все использованные результаты должным образом цитируются. У меня по тексту диссертации нет серьезных замечаний. Можно отметить лишь следующие три обстоятельства.

Во-первых, в самом начале работы для определения качества потенциала вводится функция  $\chi^2(\beta)$  [см. формулу (1.1)]. Эта функция используется на протяжении всей работы, но, периодически превращается в функцию  $\xi^2(\beta)$  [см. страницы 22, 73 и 80].

Во-вторых, в когда в параграфе 3.4 обсуждаются потенциалы взаимодействия Rb и Cs с молекулой CH<sub>4</sub>, совсем ничего не говорится, какие приближения используются для описания взаимодействия атома с молекулой чисто радиальным потенциалом и какова их точность. Поскольку вся диссертация построена на том, что строятся высокоточные потенциалы, такое обсуждение кажется необходимым.

В-третьих, в первой главе сказано, что предлагаемый метод построения потенциалов имеет большую гибкость и позволяет описывать разные «нестандартные» случаи, например псевдопересечения потенциальных кривых. В частности, это имеет место для потенциала, рассмотренного в параграфе 3.1, где у потенциала появляется изгиб. Однако, в таких случаях часто возникают потенциальные кривые с горбом, с двумя ямами и т.д. Интересно, может ли новый метод работать в таких случаях. Это в диссертации никак не обсуждается.

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Автореферат и опубликованные статьи правильно передают основные научные положения, результаты и выводы, приведенные в диссертации. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.4.4 – «Физическая химия» (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а также оформлена, согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Таким образом, соискатель Мешков Владимир Владимирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия».

Официальный оппонент:

Доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник отделения нейтронных исследований Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

Козлов Михаил Геннадьевич

18 ноября 2022 г.

Контактные данные:

тел.: +7(81371) 46964, e-mail: [mgk@mf1309.spb.edu](mailto:mgk@mf1309.spb.edu)

Специальность, по которой официальным оппонентом защищена

диссертация: 01.04.02 — теоретическая физика

Адрес места работы: 188300, Ленинградская обл., г.Гатчина, мкр. Орлова  
роща, д. 1,

Федеральное государственное бюджетное учреждение «Петербургский  
институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального  
исследовательского центра «Курчатовский институт», Отделение нейтронных  
исследований. Тел.: +7(81371) 4-60-25, e-mail: [dir@pnpi.nrcki.ru](mailto:dir@pnpi.nrcki.ru)

Подпись Козлов М.Г. удостоверяю

18 ноября 2022 г.

Ученый секретарь ПИЯФ, к. ф.-м. н.

Воробьев С.И.