

ОТЗЫВ

научного руководителя на диссертационную работу Н. В. Дозморова
«Моделирование внутримолекулярной фемтосекундной динамики в возбужденных
электронных состояниях систем различной сложности: молекулярного иода, Ван дер
Ваальсова комплекса Ar-I_2 и системы атом рубидия-гелиевая нанокляпля»,
представленную на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
1.3.17 – «химическая физика, горение и взрыв,
физика экстремальных состояний вещества».

Первичные процессы внутримолекулярной динамики, сопровождающей фотовозбуждение молекул, определяют механизм фотохимического превращения молекул и квантовые выходы различных реакционных каналов. Для контроля изменения структуры молекул в реакциях возбужденных молекул необходимо производить измерения с временным разрешением на уровне периода молекулярных колебаний, что соответствует фемтосекундному и пикосекундному временным диапазонам. Важным является построение модели, описывающей динамику, что дает возможность описывать внутримолекулярные процессы на очень детальном уровне, как правило, недоступном для полного экспериментального контроля. В то же время для того, чтобы убедиться в правильности используемой модели, необходимо сравнивать результаты моделирования с доступными результатами эксперимента, дающими наиболее детальное представление о динамике. В диссертации Н.В. Дозморова выполнено моделирование динамики процессов, протекающих в фемтосекундном и пикосекундном временных диапазонах в трех системах различной сложности: 1)-молекулярном иоде и 2)-Ван дер Ваальсовом комплексе иода с аргоном после возбуждения высоколежащих Ридберговских состояний иода, а также 3)-в комплексе атома рубидия с гелиевой нанокляпью в процессе фотодесорбции. Для всех рассмотренных процессов построены модели и проведено численное моделирование динамики и сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными. Результаты моделирования позволили в первой системе объяснить экспериментальные результаты измерения временной зависимости карт скоростей фотоионов I^+ , во второй системе показали энергетическую доступность и динамическую возможность самосборки структуры, содержащей ковалентно-связанный атом инертного газа аргона, а для третьей системы предложенная модель позволила воспроизвести экспериментальные данные не только качественно, но и количественно, чего не удавалось достичь при использовании модели, ранее предлагавшейся в литературе. По теме диссертации опубликованы 4 статьи в рецензируемых журналах, в том числе 3 - в ведущих международных журналах в области химической физики. Результаты выполненной работы были представлены на большом количестве международных и российских научных конференций, а также на научных семинарах в научных институтах России и в зарубежных научных организациях. Дозморов Н.В. внес большой вклад в выполнение работ по грантам Российского Научного Фонда и Российского Фонда Фундаментальных Исследований, в том числе международным.

За время работы над диссертацией Н.В. Дозморов зарекомендовал себя, как очень хорошо подготовленный специалист. Его отличают хорошее базовое образование, интерес к научному исследованию, инициативность, целеустремленность, и умение работать в

коллективе. Все эти качества позволили ему выполнить большую по объему и очень интересную по результатам работу, представляемую к защите. Следует отметить, что им выполнены не только теоретическое моделирование фемтосекундной динамики исследованных экспериментально систем, но и написаны программы, использовавшиеся для управления экспериментом и автоматизации измерений, с результатами которых сравниваются результаты моделирования.

Следует отметить, что за время выполнения диссертации Николай Владимирович приобрел знания и опыт не только в русле представленной работы. С его активным участием за это время выполнены работы, посвященные изучению механизма фотогенерации синглетного кислорода на поверхности фотокатализаторов, а также реализации прямого детектирования синглетного кислорода, образующегося при фотодиссоциации Ван дер Ваальсовых комплексов кислорода. Эти результаты также опубликованы в 3-х статьях в ведущих международных журналах по химической физике и физической химии.

Не вызывает сомнения, что диссертация Дозморова Николая Владимировича соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества, а ее автор достоин присуждения степени кандидата физико-математических наук.

Ведущий научный сотрудник,
руководитель группы Молекулярной фотодинамики,
доктор химических наук

А. В. Бакланов

Федеральное государственное
бюджетное учреждение науки
Институт химической кинетики и горения
им. В.В. Воеводского
Сибирского отделения
Российской академии наук
(ИХКГ СО РАН)
ул. Институтская 3, Новосибирск 630090, Россия
Тел.: (383) 330-76-23
Эл. почта: baklanov@kinetics.nsc.ru

03.03.2022

Подпись А. В. Бакланова удостоверяю,

Ученый секретарь ИХКГ СО РАН, к.ф.-м.н.



А. П. Пыряева