

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу

Дозморова Николая Владимировича

«Моделирование внутримолекулярной фемтосекундной динамики в возбужденных электронных состояниях систем различной сложности: молекулярного иода, Ван дер Ваальсова комплекса Ar-I₂ и системы атом рубидия-гелиевая нанокапля», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17–химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Актуальность темы диссертации

Внедрение лазерных технологий с фемтосекундным временным разрешением в практику исследований химических превращений открыло возможности изучения не только быстрой кинетики реагентов и продуктов, но и короткоживущих промежуточных частиц. До настоящего времени эти методы широко используются в исследованиях кинетики и динамики простейших фотохимических процессов таких как перенос энергии или заряда, не осложненных разрывом и образованием химических связей. С позиций этих исследований механизм фотохимических процессов в Ван дер Ваальсовых комплексах, системах, включающих атом рубидия и гелиевую нанокаплю, исследуемых в диссертационном исследовании Н.В. Дозморова, представляется достаточно сложным, тем не менее ему удалось выполнить расчеты динамики этих процессов и провести сравнение с экспериментальными данными. В связи с тем, что методы оптической лазерной спектроскопии высокого временного разрешения продолжают активно внедряться в практику научных исследований, выполненные исследования является актуальными.

Обоснованность и достоверность научных положений и выводов

Обоснованность и достоверность результатов, полученных в диссертационной работе Н.В. Дозморова, обеспечивается применением моделей, основанных на современных теоретических представлениях о внутримолекулярной фемтосекундной динамике, согласием полученных результатов с экспериментальными данными. О достоверности полученных результатов также свидетельствуют публикации в высокорейтинговых журналах, включающих серьезное рецензирование, и их обсуждение на международных и всероссийских научно конференциях.

Основные научные результаты и их новизна

Следует отметить, что современная спектроскопия позволяет получать обширную информацию о динамике элементарных химических процессов, однако информация, содержащаяся в спектрах, лишь косвенно связана с динамическими характеристиками химических процессов. В связи с этим,

физическая интерпретация спектров, определение динамических и кинетических параметров по спектрам до сих пор остается сложной научной проблемой. Получить физически важную информацию, как правило, удается лишь в рамках количественного теоретического описания молекулярных процессов и их сопоставления с экспериментальными данными. Эта задача успешно решена в диссертации Н.В. Дозморова для трех видов молекулярных систем.

Значимость основных результатов для науки и практики

Результаты, представленные в диссертационной работе Н.В. Дозморова создают основу количественной интерпретации экспериментальных данных по динамике молекул в ридберговских состояниях.

Содержание диссертационной работы

Диссертационная работа Н.В. Дозморова изложена на 95 страницах машинописного текста, содержит 31 рисунок и 3 таблицы. Работа состоит из введения, обзора современных подходов к исследованию фемтосекундной внутримолекулярной динамики (глава 1), трех глав, посвященных описанию результатов, полученных в диссертационном исследовании, основных результатов и выводов, а также списка цитируемой литературы, состоящего из 95 наименований

В первой главе представлен обзор теоретических и экспериментальных подходов к исследованию внутримолекулярной динамики.

Во второй главе исследована динамика молекулярного йода после двухквантового фотовозбуждения в ридберговское состояние. Разработана математическая модель, объясняющая результаты измерения карт скоростей фотоионов I^+ . Движение ядер моделируется в рамках классического и квантового описания. Выполненные расчеты показали, что предложенная модель хорошо описывает результаты измерения карт скоростей фотоионов I^+ , регистрируемых в экспериментах.

В третьей главе разработана модель и проведено моделирование динамики в Ван дер Ваальсовом комплексе аргона с молекулой йода в состояниях ионной пары $Ar...I^+I^-$. Расчеты подтвердили возможность образования структуры Ar^+I-I^- , содержащей ковалентно-связанный атом аргона.

В четвертой главе построена модель и выполнены квантово-механические расчеты динамики фотодесорбции атомов рублидия с поверхности гелиевой нанокapли. Проведено сравнение результаты моделирования с результатами экспериментов для различных длин волн возбуждающего излучения, которое показало, что модель хорошо описывает

экспериментальные данные для динамики фотодесорбции при возбуждении состояния бр Σ комплекса и удовлетворительно для состояния бр Π .

В заключении сформулированы **основные результаты и выводы**.

К достоинствам работы следует отнести, то что автору удалось удачно сочетать преимущества экспериментальных и теоретических подходов.

Замечания по диссертационной работе

Принципиальных замечаний по работе нет. Отмечу лишь отдельные недостатки, относящиеся к представлению материала в диссертации.

1. На стр. 30 рекуррентное соотношение для полиномов Чебышева записано с ошибками.
2. На стр. 39 приводятся значения периодов колебаний системы в состоянии ионной пары, которому соответствует сильно ангармоничный потенциал. В таком потенциале период колебаний зависит от энергии системы, поэтому необходимо было привести значение энергии, которой соответствует это движение.
3. Во второй главе вводятся пересекающиеся термы, являющиеся по своему смыслу адиабатическими. Далее, предполагая, что в этом адиабатическом базисе матрица гамильтониана недиагональная, осуществляется переход к адиабатическим состояниям. При этом недиагональный матричный элемент называется неадиабатическим взаимодействием. Это неправильно, так как, по определению, неадиабатическое взаимодействие это взаимодействие между адиабатическими состояниями. Впрочем, эта неточность в литературе встречается часто.
4. На стр. 43 утверждается: " Центр волнового пакета имеет энергию равную 74180 см^{-1} , что соответствует колебательному уровню с номером около 1000." Оценка номера колебательного состояния кажется неправдоподобной. В двухатомных молекулах обычно имеется порядка нескольких десятков дискретных колебательных состояний, выше начинается непрерывный спектр. Вероятно, нужно отсчитывать энергию не от минимума терма основного состояния, а от минимума терма, по которому происходит движение.
5. На стр. 62 утверждается, что ^3He не проявляет сверхтекучих свойств. В действительности же ^3He переходит в сверхтекучее состояние, но при температурах очень близких к абсолютному нулю.
6. В уравнении 66 на стр. 71 введена величина, N_{Rb^+} , но не дано пояснение ее смысла.
7. На стр. 72 делается вывод: "Следовательно, кинетическая энергия ионов рубидия на бесконечности должна быть равна 1055 и 360 см^{-1} , а не 405 и 145 см^{-1} , как следует из эксперимента." Однако не обсуждается в чем причина расхождений, какие значения следует считать более точными.

Публикации, отражающие основное содержание работы, и апробация результатов

По теме диссертационной работы опубликованы: 4 статьи в высокорейтинговых рецензируемых журналах. Публикации по теме исследования содержат все основные результаты, представленные в диссертации. Основные результаты диссертационной работы прошли апробацию на многих российских и международных конференциях. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации. Поставленные в работе цели достигнуты, полученные результаты достоверны.

Заключение по диссертационной работе

Диссертационная работа Дозморова Николая Владимировича

«Моделирование внутримолекулярной фемтосекундной динамики в возбужденных электронных состояниях систем различной сложности: молекулярного йода, Ван дер Ваальсова комплекса Ar-I_2 и системы атом рубидия-гелиевая нанокля» обладает внутренним единством и является законченным научным исследованием, проведенным на высоком научном уровне. Совокупность разработанных автором теоретических положений можно квалифицировать как научно-квалификационную работу, в которой содержится решение задачи, имеющей существенное значение для физики сверхбыстрых фотохимических процессов в возбужденных молекулах и комплексах. Работа полностью соответствует паспорту специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Считаю, что диссертационная работа «Моделирование внутримолекулярной фемтосекундной динамики в возбужденных электронных состояниях систем различной сложности: молекулярного йода, Ван дер Ваальсова комплекса Ar-I_2 и системы атом рубидия-гелиевая нанокля» отвечает критериям п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), а ее автор, Дозморов Николай Владимирович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Официальный оппонент

Иванов Анатолий Иванович
доктор физико-математических наук

специальность 01.04.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества», профессор
профессор кафедры теоретической физики и волновых процессов
Федерального государственного автономного образовательного учреждения
высшего образования «Волгоградский государственный университет»

Адрес: 400062, Южный федеральный округ, Волгоградская область,
г. Волгоград, Пр. Университетский, 100.

Тел.: +7(8442) 46-48-94

Электронная почта: anatoly.ivanov@volsu.ru

Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные
с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

«20» апреля 2022 года



А.И. Иванов

