

ОТЗЫВ

На автореферат диссертационной работы Дозморова Николая Владимировича «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 нанокапля», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Диссертационная работа Дозморова Николая Владимировича посвящена применению методов моделирования динамики внутримолекулярных процессов для трех различных систем: молекулярного иода, Ван дер Ваальсова комплекса Ar-I_2 , а также системы атом рубидия-гелиевая нанокапля. В частности, в представленной работе использовались два подхода: моделирование путем решения уравнений движения в рамках классической физики и моделирование эволюции волновых пакетов в рамках квантовой физики. Особого внимания заслуживает тот факт, что данная работа включает в себя также экспериментальную часть, с данными которой проводилось сопоставление результатов моделирования.

Тема диссертации является актуальной, поскольку она касается развития методов моделирования, позволяющих получение более детальной информации о внутримолекулярных процессах, недоступной для экспериментального исследования, в то время как изучение таких процессов имеет важное теоретическое и практическое значение в фотохимии.

В диссертации было получено большое количество интересных в научном плане результатов моделирования, среди которых, в частности, можно выделить следующие. В рамках классического и квантово-механического моделирования фемтосекундной динамики молекулярного иода в состояниях ионной пары объяснены результаты измерения карт скоростей фотоионов I^+ , регистрируемых в двухимпульсных фемтосекундных экспериментах. На основе сопоставления данных результатов установлено и объяснено наличие искажения формы потенциала. Проведенное классическое моделирование внутримолекулярной динамики в Ван дер Ваальсовом комплексе аргона с молекулой иода в состояниях ионной пары $\text{Ar}\dots\text{I}^+\text{-I}^-$ показало динамическую возможность самосборки структуры $\text{Ar}^+\text{-I-I}^-$, содержащей ковалентно-связанный атом аргона, которая была предложена для объяснения экспериментальных данных по фотохимии Ван дер Ваальсовых комплексов Ar-I_2 . Построенная модель внутримолекулярных процессов, происходящих во время фотоинициируемой десорбции атомов рубидия с поверхности гелиевой нанокапли применена для различных длин волн возбуждающего излучения позволила объяснить результаты измерения карт скоростей атомов рубидия, регистрируемых в двухимпульсных фемтосекундных экспериментах.

В целом диссертационная работа Н.В. Дозморова является законченным исследованием и проведена на высоком научном уровне, о чем, в частности, говорит хорошее согласие теоретических и экспериментальных данных. Автореферат написан хорошо, информация изложена в нем очень четко, а приведенные выводы обоснованы.

Считаю, что диссертационная работа «Моделирование внутримолекулярной фемтосекундной динамики в возбужденных электронных состояниях систем различной сложности: молекулярного иода, Ван дер Ваальсова комплекса Ag-I_2 и системы атом рубидия-гелиевая нанокапля» соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе отвечает критериям п. 9 Положения о присуждении 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.

Белоголова Александра Максимовна

кандидат химических наук
специальность 1.4.4. Физическая химия

младший научный сотрудник лаборатории непердельных гетероатомных соединений

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Иркутский институт химии им. А.Е. Фаворского Сибирского отделения Российской академии наук (ИрИХ СО РАН)

664033, Россия, г. Иркутск, ул. Фаворского, 1

Тел. +7 (952) 619 97 63,

Электронная почта: alesta1220@mail.ru

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

Подпись Белоголовой А.М. заверяю

Ученый секретарь ИрИХ СО РАН, к.х.н.

21.04.2022



Т.Н. Комарова