

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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 нанокапля”, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Процессы внутримолекулярной динамики электронно-возбужденных молекул, комплексов и кластеров определяют их распад (люминесценцию, диссоциацию и преддиссоциацию). Эти процессы изучаются экспериментально в фемтосекундном и пикосекундном временных диапазонах, а также теоретически. В последнем случае очень важным является построение модели, описывающую динамику и сравнение результатов, которые дает модель, с экспериментальными данными. В рамках рецензируемой диссертационной работы осуществляется моделирование внутримолекулярных процессов в трех различных по сложности системах: высоковозбужденные, Ридберговские и ионно-парные, состояния молекулярного йода, ван-дер-Ваальсовы (ВДВ) комплексы ArI_2 в ионно-парных (ИП) состояниях, атомы рубидия, сорбированные на поверхности гелиевой нанокапли.

Поэтому актуальность диссертационной работы Дозморова Н.В. представляется несомненной.

Я хотел бы выделить наиболее интересные и важные, на мой взгляд, результаты работы.

1. Показано путем моделирования экспериментальных данных, полученных методом velocity map imaging, VMI, что оптический двухфотонный ($2h\nu$) переход в Ридберговское состояние I_2 сопровождается неадиабатическим переходом в ионно-парное $f0_g^+$ состояние 2-го ($\Gamma(^1\text{S}) + \Gamma(^3\text{P}_1)$) яруса. Имеет место значительное возмущение, матричный элемент равен 200 см^{-1} при $r_{1-1} = 30 \text{ \AA}$, Ридберговского и $f0_g^+$ состояний. Тип симметрии Ридберговского

состояния в автореферате не указан, однако, учитывая правила отбора для двухфотонных переходов и возмущений, можно полагать, что это – состояние 0_g^+ .

2. Проанализирована динамика внутримолекулярных процессов, имеющих место после оптического двухфотонного заселения Ридберговского (по-видимому, 0_g^+) состояния. Показано, что имеет место «самосборка» (self-assembling) ВДВ комплексов $\text{ArI}_2 \leftrightarrow \text{Ar}^+ \cdot \text{I} \cdot \text{I}^-$, с ковалентной связью $\text{Ar}^+ \cdot \text{I}$.
3. Удалось промоделировать временную зависимость количества образующихся при использовании метода pump-probe количества десорбированных с поверхности нанокapли гелия He_{2000} атомов рубидия при оптическом заселении атомов в состояние $6p\Sigma$.

Я должен отметить некоторые недостатки, обнаруженные мною в автореферате:

1. На мой взгляд, вряд ли полученные данные о наличии связи иона Ar^+ с атомом йода позволяют «предложить новый подход для синтеза химических соединений инертных газов (Rg) через фотовозбуждение ... $\text{Rg} \cdot (\text{Hal})_2 \dots$ » (1-я и 2-я строки снизу на стр. 6). Эти системы являются типичными слабосвязанными комплексами с энергией связи, не превышающими несколько сотен см^{-1} .
2. В литературе принято ИП состояния I_2 не обозначать как $\text{I}^+ \cdot \text{I}^-$. $\text{I}^+ \cdot \text{I}^-$ это – пределы их диссоциации.
3. Для построения поверхностей потенциальной энергии (ППЭ) ВДВ комплексов ArI_2 в ИП состояниях недопустимо использовать спектроскопические характеристики этого комплекса в основном состоянии. Они отличаются очень сильно, см. Chapters 4, 6 в S. Lukashov, A. Petrov, A. Pravilov, The Iodine Molecule. Insights into Intra- and Intermolecular Perturbations. Springer, 2018.

Отмечу, что указанные выше и другие, более мелкие недостатки, не ставят под сомнение достоверность и обоснованность большинства полученных результатов. Все они являются новыми; их значимость подтверждается фактом публикации статей в престижных международных журналах

Автор диссертации, несомненно, является квалифицированным специалистом в области химической физики. Считаю, что диссертация Дозморова Н.В. “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 нанокля”, удовлетворяет требованиям к кандидатским диссертациям, в том числе отвечает критериям п.9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденных постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), а ее автор, Дозморов Н.В., заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Правилон Анатолий Михайлович
доктор физ.-мат. наук, профессор
специальность 01.04.17 – химическая физика,
профессор физического факультета Санкт-Петербургского государственного университета (СПбГУ) 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб. 7/9,
тел. +7 911 2557967, e-mail: a.pravilov@spbu.ru

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

Подпись Правилова А.М. заверяю

Личную подпись
А.М. Правилова
заверяю
И.О. начальника отдела кадров МЭЭ
И.И. Константинова



Текст документа размещен
в открытом доступе
на сайте СПбГУ по адресу
<http://spbu.ru/science/expert.htm>