

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Дозморова Николая Владимировича "Моделирование внутримолекулярной фемтосекундной динамики в возбужденных электронных состояниях систем различной сложности: молекулярного йода, ван дер ваальсова комплекса Ag-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

Представленная диссертационная работа Н.В. Дозморова важна для дальнейшего понимания процессов, протекающих в высоковозбужденных состояниях молекул под действием лазерного излучения, которые характеризуются фемтосекундной шкалой времен. Для сравнения с экспериментальными данными им выполнено классическое и квантовомеханическое моделирование фемтосекундной динамики молекул йода для явлений, имеющих место в возбужденных электронных состояниях ионной пары. Аналогичная работа была проделана для моделирования внутримолекулярной динамики ван дер ваальсовых комплексов Ag-I_2 и фотоиницируемой десорбции атомов рубидия с поверхности гелиевой нанокапли. Изучение этих процессов – сложная задача, осмысление которой идет в настоящее время на уровне моделей. Чтобы убедиться в правильности выдвигаемых моделей, необходимо сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными. Представленная работа находится в русле этих идей на самом переднем направлении таких исследований, давая возможность достоверно принять или опровергнуть рабочие предположения и гипотезы. Заявленная тема диссертации весьма актуальна.

Представленная работа производит очень хорошее впечатление с технической точки зрения. Применяются самые современные методы теоретического моделирования

процессов. Там, где необходимо, применяется метод классических траекторий и, в большинстве случаев, квантово-механическое рассмотрение с помощью техники волновых пакетов. В частности используются методы, такие как разностная схема второго порядка, метод расщепления экспоненциального оператора, метод Чебышева. Для расчета волновых функций и энергий колебательных уровней используется одна из последних численных программ. Высокую степень обоснованности полученных достижений дают, в совокупности, современная техника вычислений и ее умелое использование наряду с исключительно четким пониманием физики внутримолекулярной фемтосекундной динамики возбужденных состояний.

Впервые сделан вывод о том, что происходит искажение формы потенциала ионной пары, обусловленное неадиабатическим взаимодействием между термами ионной пары и ридберговским состоянием молекулы иода, и установлена его величина около 200 cm^{-1} . Доказано возникновение динамической структуры $\text{Ag}\dots\text{I}^+ - \text{I}^-$, содержащей химически связанный атом аргона, для чего требуется лишь небольшое возбуждение ван дер вальсовской колебательной моды исходного комплекса $\text{Ag} - \text{I}_2$. В работе рассмотрена фемтосекундная динамика десорбции рубидия с поверхности гелиевой нанокapли и представлены численные результаты квантового моделирования. Численные результаты состояли в моделировании количества образующихся ионов рубидия и их средней скорости при различных задержках между импульсами. Предложенная модель хорошо описывает экспериментальные данные для электронных состояний $6p\Sigma$ и $6p\Pi$. Показано, что предложенная модель описывает опытные данные как качественно, так и количественно. Итак, столь впечатляющее продвижение по сравнению с имеющимися литературными данными доказывает новизну проведенного исследования.

Значимость для науки и практики полученных результатов состоит в следующем. Экспериментальные данные по исследованию фемтосекундной динамики высоковозбужденных ридберговских состояний молекулярного иода удалось объяснить в рамках

созданной модели непротиворечивым образом не только качественно, но и количественно. Предложен новый подход синтеза молекул, состоящих из атомов инертных газов и галогенов, путем фотовозбуждения ван дер ваальсовских комплексов. Полученные результаты моделирования фотоиницируемой десорбции атомов рубидия с поверхности гелиевой нанокapли несомненно вносят весомый вклад в понимание физики этого явления.

В заключении следует специально отметить, что материал диссертации хорошо передан в автореферате при хорошем оформлении и языке изложения.

Считаю, что диссертационная работа "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 нанокapля" 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.

Стрекалов Михаил Леонидович

Подпись

кандидат физико-математических наук
специальность 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества
старший научный сотрудник лаборатории теоретической химии

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского
Сибирского отделения Российской академии наук (ИХКГ СО РАН)
630090, Россия, г. Новосибирск, ул. Институтская, 3
Тел. +7 (383) 330 15 03,
Электронная почта: strekalov@kinetics.nsc.ru

12.05.2022

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

Подпись Стрекалова М.Л. заверяю

Ученый секретарь (ИХКГ СО РАН)

к.ф.-м.н. Пыряева А.П.

12.05.2022



МП Подпись