

## Отзыв официального оппонента на диссертацию

Опарина Даниила Владимировича "Спектроскопические проявления динамики молекулярных столкновений в системах линейная молекула – атом", представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальностям 01.04.05 "Оптика".

В диссертации Опарина Даниила Владимировича с использованием численных методов исследованы проявления молекулярных столкновений на форму полос индуцированного ими поглощения. Автор выполнил значительную по объему аналитическую работу, на основании которой разработал модели и алгоритмы, а также создал расчетные программы численного моделирования столкновений между атомом и линейной молекулой. Особое внимание уделено разработке и применению метода расчета влияния столкновений на форму индуцированных полос поглощения. В диссертационной работе выполнены многочисленные расчеты, что позволило автору проиллюстрировать работу конкретными примерами. Так с помощью выполненных расчетов и анализа их результатов, автору удалось исследовать влияние кластерообразования на форму полос индуцированного поглощения в системах  $\text{CO}_2$  – атом благородного газа. Приведены результаты анализа влияния спектральных свойств моментов сил на форму далеких крыльев разрешенных полос линейных молекул в их смесях с благородными газами. Методы и модели, разработанные в работе, можно применить, например, к решению задач физики атмосферы, в которых важен расчет прозрачности оптических сред в зависимости от их состава и физических характеристик (температура, давление и т.д.). Важным в этой работе является также

использование возможности применения спектроскопических данных для верификации расчетных потенциалов межмолекулярного взаимодействия. В связи с этим открывается возможность их применения для анализа динамики столкновения молекул, а также образования и распада метастабильных комплексов.

Исследование влияния параметров парных потенциалов взаимодействия на форму индуцированных полос поглощения имеет фундаментальное значение и может быть источником полезной информации о численных значениях этих параметров. Наряду со сказанным выше, это обстоятельство определяет как **научную новизну**, так и **практическую значимость** диссертации. Поэтому тема диссертационной работы является **актуальной**.

Обзор литературных источников показал, что имеются веские основания для математического моделирования влияния молекулярных столкновений на форму полос поглощения в системах линейная молекула – атом.

Диссертационная работа состоит из семи разделов: введения, четырех глав, заключения и списка литературы, она напечатана на 86 страницах текста, содержит 30 рисунков, 2 таблицы и 148 ссылок на литературные источники.

Во введении обосновывается **актуальность исследования**. **цель работы, сформулированы задачи исследования, обоснована научная новизна и значимость исследования, охарактеризована научная достоверность, сформулированы научные положения, выносимые на защиту, проанализирована значимость полученных результатов для науки и практики, указан личный вклад автора, приведена апробация работы.**

Первая глава носит обзорный характер применительно к основным проявлениям бинарных столкновений в инфракрасных спектрах молекулярных газов. В главе описываются типы столкновительных возмущений молекул, основные проявления механических и электрооптических возмущений в колебательно-вращательных спектрах. Проанализированы проявления стабильных и метастабильных димеров в спектрах газов. Внимание уделено реферированию работ, использующих траекторные методы расчета различных столкновительных эффектов. На основе анализа литературных данных сформулированы цели и поставлены задачи диссертационной работы.

Во второй главе представлено описание используемого метода классических траекторий, описание ведется на примере расчета спектров индуцированного поглощения смеси CO<sub>2</sub> – благородный газ. В спектре, индуцированном взаимодействиями, кроме обычных пролетных траекторий возможны траектории с образованием и последующим распадом метастабильных состояний, а также траектории относительного движения частиц в составе стабильного димера. Выделение доли стабильных и метастабильных димеров представляет значительные трудности при давлениях газа, близких к атмосферному, для решения этой задачи были разработаны два варианта траекторного метода, позволяющих по отдельности проанализировать вклад димеров и квазисвязанных состояний в полосы индуцированного поглощения.

Третья глава посвящена исследованию влияния динамики молекулярных столкновений, включая кластерообразование, на форму полос индуцированного поглощения для систем углекислый газ - атом

благородного газа. Представлены и проанализированы результаты расчетов спектральных вкладов от свободных траекторий, траекторий, сопровождающихся образованием метастабильных димеров, и вклада стабильных димеров для смесей  $\text{CO}_2$  с Ar и Xe. Для контроля траекторных расчетов и более детального рассмотрения димерного вклада в спектральную функцию был использован метод спектральных моментов. В работе также выполнено сопоставление рассчитанных спектров с наблюдаемыми в инфракрасной и микроволновой области. Развитый метод расчета индуцированного столкновениями поглощения позволяет разделить вклады от обычных столкновений, стабильных и метастабильных димеров. После соответствующих модификаций предложенный метод может быть использован для расчета формы полос индуцированного поглощения, вызванного столкновениями двух линейных молекул. В частности, это позволит проанализировать роль димеров  $\text{CO}_2$  в полосах индуцированного поглощения, что имеет большое значение для планетарных исследований.

В четвёртой главе проведено исследование спектральных свойства момента сил, действующих на молекулу в процессе столкновения, и формы крыльев разрешенных полос линейных молекул в смесях с благородными газами. В начале главы приводятся результаты общей теории контура крыльев колебательно-вращательных полос. Проведена оценка вкладов метастабильных и стабильных димеров в интенсивность крыльев полос, также проведена оценка возможного вклада в интенсивность крыльев, связанного с появлением индуцированного дипольного момента при взаимодействии молекулы с атомом. Проведено сравнение экспериментальных данных и результатов расчета поглощения в крыльях полос  $\nu_3$   $\text{CO}_2$  и основного

тона CO для смесей этих молекул с благородными газами. Сравнение полученных значений с приведенными в литературе экспериментальными данными показало высокую точность и эффективность разработанного в диссертационной работе подхода. Следует отметить, что развитый метод расчета поглощения в области крыльев разрешенных полос, также как и при расчете индуцированных спектров, не содержит эмпирических параметров и сравнительно легко может быть распространен на случаи более сложных молекулярных систем. Полученные на этом пути результаты могут, в частности, найти широкое применение при анализе континуального поглощения в задачах физики атмосферы.

Из анализа материалов диссертации следует, что поставленные автором задачи выполнены, и в целом диссертация представляет собой законченное исследование, имеющее большое научное и практическое значение.

*К недостаткам работы можно отнести*

1. В работе для расчетов траекторий движения частиц применен метод потенциалов взаимодействия, который, однако, не является столь универсальным, как *ab initio* методы, например метод молекулярной динамики Car-Parrinello.

2. В работе не применяются современные методы компьютерной графики, позволяющие визуализировать стабильные и метастабильные конфигурации комплексов. Также отсутствуют анимационные фильмы визуализации перемещения молекулы и атома при их связывании в комплексы. Это обстоятельство отрицательно сказывается на наглядности демонстрации результатов моделирования аудитории.

3. Отсутствуют оценки погрешности проводимых расчетов.

