

ОТЗЫВ

на дипломную работу Финенко Артема Андреевича «Моделирование спектров столкновительно-индуцированного поглощения в дальней инфракрасной области методом классических траекторий»

Исследования спектров, индуцированных межмолекулярными взаимодействиями, представляют собой обширный и динамично развивающийся раздел спектроскопии, находящий применение в физике газов, жидкостей и твердых тел, физике атмосферы и астрофизике. Дипломная работа А.А. Финенко посвящена моделированию столкновительно-индуцированных спектров поглощения газофазных молекул в микроволновом и инфракрасном диапазонах. Возникновение таких спектров связывается с проявлением межмолекулярных взаимодействий, ответственных за индуцирование дипольного момента в ходе парных столкновений. Данное исследование имеет важное прикладное значение для мониторинга и прогнозирования состояния атмосферы Земли, уточнения ее климатических моделей, а также для целого ряда астрофизических приложений, связанных с изучением атмосфер холодных звезд, экзопланет и пр. Поэтому актуальность и практическая значимость работы не вызывает сомнений.

Из существующих методов расчета столкновительно-индуцированного поглощения наиболее точными являются квантово-механические. Однако эти методы требуют огромных вычислительных затрат, а их применение в наибольшей степени оправдано для условий низких температур. В то же время континуальная природа столкновительно-индуцированных спектров позволяет в большинстве случаев ограничиться подходами, основанными на использовании методов классической механики. Автор использует метод классических траекторий, как наиболее рациональный с точки зрения современных возможностей его численной реализации при использовании многомерных поверхностей потенциальной энергии и индуцированного дипольного момента, рассчитанных методами квантовой химии. Целью работы является развитие оригинального метода для классического траекторного расчета спектров столкновительно-индуцированного поглощения многоатомных систем.

В работе изложены теоретические основы взаимодействия излучения с молекулярными системами, разработана методика траекторных расчетов и последовательно, по мере усложнения, рассмотрены столкновительно-индуцированные спектры поглощения в двухатомной системе (He–Ar), в молекулярных парах, состоящих из атома и линейной молекулы (CO₂–Ar) и двух линейных молекул (N₂–N₂). Во всех случаях траекторные расчеты оказываются в хорошем согласии как с квантовыми расчетами, так и с экспериментальными данными. Это подтверждает работоспособность развиваемой расчетной методики и ее применимости для моделирования рототрансляционных спектров индуцированного поглощения. Среди авторских достижений следует отметить разработку оригинальных вычислительных процедур, позволяющих производить численное интегрирование динамических систем уравнений с использованием матриц кинетической энергии в форме Лагранжа и их производных.

Представленный обзор литературы весьма информативен и полностью соответствует теме работы. Среди результатов, имеющих большую практическую значимость, можно указать на расчеты столкновительно-индуцированного поглощения в N₂–N₂. Хотя азот является весьма распространенным элементом в Солнечной системе, молекула N₂ не имеет дипольно-разрешенных линий поглощения в микроволновом, видимом и инфракрасном диапазонах. Эффект поглощения молекулярных пар (N₂)₂ представляет собой, возможно, наиболее приемлемый инструмент для детектирования молекулярного азота в атмосферах планет. Развиваемая методика позволяет рассчитать спектры столкновительно-индуцированного поглощения для использования в базах данных по поглощению значимыми атмосферными молекулами, например, для пополнения специального раздела популярной спектроскопической базы данных HITRAN, посвященного столкновительно-индуцированным спектрам.

Используемые в работе расчетные методы соответствуют поставленной задаче. Полученные результаты являются новыми и оригинальными, представляют как фундаментальный, так и практический интерес. Изложение материала дается четко и последовательно, поставленные в работе цели достигнуты, выводы полностью обоснованы. Автор показывает себя грамотным, компетентным специалистом. Работа хорошо оформлена и заслуживает оценки «отлично».

доктор физ.-мат. наук,
зав. отделом Молекулярной спектроскопии
Института спектроскопии РАН
г. Троицк, г. Москва



Л.А. Сурин

подпись Сурина Л.А. заверяю
Ученый секретарь ИСАН, к.ф.-м.н.



Е.В. Перминов