

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации В.А. Терашкевич

«Неэмпирический расчет и неадиабатический анализ структурно-динамических параметров астрофизически важных двухатомных частиц: катиона ArH^+ и радикала CN »,

представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 - «Физическая химия».

Фундаментальные данные об энергетических и радиационных характеристиках ряда двухатомных молекул, представляющих ярко выраженный астрохимический интерес, являются необходимым условием для, например, моделирования спектральных свойств экзопланетных атмосфер, установления механизмов химической эволюции межзвездной среды, приводящей к образованию молодых звезд и новых планетарных систем в космологическом масштабе времени. Использование таких данных для спектральной диагностики высокоскоростных газоплазменных потоков представляет особый интерес, так как позволяет детально контролировать процессы теплообмена в реальном масштабе времени при вхождении массивных космических тел и летательных аппаратов в плотные слои земной атмосферы. В связи со сложностью лабораторных экспериментов и дороговизной проведения прямых космических наблюдений очевидна необходимость использования альтернативных методов теоретической молекулярной спектроскопии для нахождения энергетических и радиационных, а также транспортных свойств изолированных молекул.

Все это свидетельствует о высокой степени актуальности диссертации В.А. Терашкевич, которая в значительной степени и посвящена развитию методов моделирования энергетических, радиационных и транспортных свойств молекул в

широком интервале электронно-колебательно-вращательных возбуждений с точностью, достаточной для решения задач оптической диагностики.

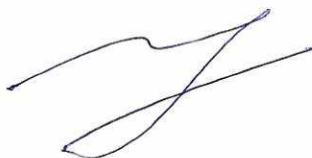
Среди полученных в диссертации результатов я бы отметил следующие:

1. Расчеты из первых принципов адиабатического потенциала и функции собственного дипольного момента основного состояния молекулярного иона AgH^+ в широком диапазоне межъядерных расстояний.
2. В интервале поступательной температуры $T \in [100; 10\ 000]$ К оценены величины коэффициентов диффузии, вязкости, теплопроводности, а также сечения неупругих столкновений в системе $\text{Ag} - \text{протон}$.
3. Проведены оценки верхней границы возможного изменения фундаментального отношения m_p/m_e в космологическом масштабе времени путем сопоставления наблюдаемых при сильном «красном смещении» вращательных спектров $^{36,38}\text{AgH}^+$ с их лабораторными аналогами.
4. Расчеты из первых принципов функций потенциальной энергии, дипольных моментов электронных переходов, а также неадиабатических матричных элементов взаимодействия между низколежащими уровнями молекулы CN .
5. Изучено влияние локальных и регулярных спин-орбитальных и электронно-вращательных взаимодействий на тонкую структуру ровибронных уровней $X^2\Sigma^+ \sim A^2\Pi \sim B^2\Sigma^+$ комплекса радикала CN .

Особо стоит отметить разработку прецизионной неадиабатической модели описания энергетических свойств возмущенных состояний $X^2\Sigma^+ \sim A^2\Pi \sim B^2\Sigma^+$ молекулы CN , что существенно расширяет возможности решения задач спектральной диагностики изотопологов данной молекулы в условиях повышенных температур и низких давлений, в том числе при нарушении локального термодинамического равновесия.

Считаю, что диссертационная работа Терашкевич В.А. по своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов соответствует критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», а автор работы - Терашкевич В.А. - достойна присуждения учёной степени кандидата наук по специальности 1.4.4 - «Физическая химия».

Шабает Владимир Моисеевич
доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры квантовой механики ФГБОУ ВО
«Санкт-Петербургский государственный университет»



07.10.2022

Почтовый адрес: 198504, г. Санкт-Петербург, Петродворец, Ульяновская, д. 1,
НИИФ СПбГУ

Тел.: +7 (812) 428-45-52

E-mail: v.shabaev@sbpu.ru



07.10.2022

