



УТВЕРЖДАЮ:
Проректор по научной работе СПбГУ

С.В. Аплонов
/С.В. Аплонов/

«*10 апреля*» 2017 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет».

Диссертация «Спектроскопические проявления динамики молекулярных столкновений в системах линейная молекула – атом» выполнена на кафедре молекулярной спектроскопии Санкт-Петербургского государственного университета.

В период подготовки соискатель Опарин Даниил Владимирович обучался в аспирантуре федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» на кафедре молекулярной спектроскопии.

В 2016 году окончил аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» по специальности 01.04.05 – Оптика.

Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2016 г. федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет».

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор кафедры молекулярной спектроскопии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» Филиппов Николай Николаевич.

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

Актуальность темы исследования

Инфракрасные спектры поглощения, обусловленные колебательным и вращательным движением молекул, являются важными источниками информации не только о строении молекул и об особенностях внутримолекулярного движения, но также и о характеристиках межмолекулярных взаимодействий. Разработка моделей, описывающих спектральные проявления столкновительных возмущений вращательного и колебательного движения молекул, направлена на решение двух актуальных задач. К первому классу задач относятся задачи расчета свойств прозрачности оптических сред в зависимости от их состава и физических характеристик (температура, давление...). В частности, обширный круг задач физики атмосферы. Второе направление – это использование спектроскопических данных для верификации рассчитанных потенциалов межмолекулярного взаимодействия, для анализа динамики столкновения молекул, для анализа образования и распада метастабильных комплексов. Оба эти направления нашли отражение в работе соискателя.

Предложенный в работе метод расчета классических траекторий позволил выделить вклады стабильных и метастабильных димеров в полосах индуцированного

поглощения, а также связать форму крыльев полос с количественными характеристиками взаимодействия молекул, с потенциалами межмолекулярного взаимодействия без использования подгоночных параметров. Полученные соискателем результаты показали важность учета метастабильных состояний при расчетах спектров, формируемых за счет взаимодействия частиц в газах. Используемые расчетные методики позволили более детально проанализировать свойства метастабильных димеров, в частности, найти распределение времен их жизни.

Выполненная соискателем работа является важным шагом в понимании процессов формирования континуального поглощения в газовых средах. Отдельные разделы работы были выполнены в рамках двух грантов РФФИ и НИР из средств СПбГУ, в которых соискатель участвовал в качестве исполнителя.

Личное участие

Все результаты, представленные в диссертационной работе, получены при непосредственном участии соискателя. Соискателем были разработаны программы для расчёта вклада в контур полосы индуцированного спектра от стабильных, метастабильных димеров и пролетных траекторий, программы расчета спектральной функции момента сил и формы далеких крыльев разрешенных полос. Произведены необходимые расчеты и обработка полученных результатов. Расчеты проводились на вычислительной технике кафедры молекулярной спектроскопии и с использованием оборудования ресурсного центра «Вычислительный центр СПбГУ».

Степень достоверности полученных результатов

Результаты, изложенные в диссертации, были представлены на трех международных конференциях:

1. The XVII Symposium on High Resolution Molecular Spectroscopy «HighRus-2012» (XVII Международный симпозиум по молекулярной спектроскопии высокого разрешения), 2-7 июля 2012 года, Зеленогорск, Ленинградская область, Россия.
2. The 23th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy (23-я международная конференция по молекулярной спектроскопии высокого разрешения), 2-6 сентября 2014 года, Болонья (Bologna), Италия.
3. The XVIII Symposium and School on High Resolution Molecular Spectroscopy «HighRus-2015» (XVIII Международный симпозиум и школа молодых учёных по молекулярной спектроскопии высокого разрешения), 30 июня - 4 июля 2015 года, Томск, Россия.


Опубликованы две статьи в журналах списка ВАК:

1. Asfin R.E., Buldyreva J.V., Sinyakova T.N., Oparin D.V., Filippov N.N. Communication: Evidence of stable van der Waals CO₂ clusters relevant to Venus atmosphere conditions // J. Chem. Phys., Vol. 142, No. 5, 2015. pp. 051101(1-4).
2. Oparin D.V., Filippov N.N., Grigoriev I.M., Kouzov A.P. Effect of stable and metastable dimers on collision-induced rototranslational spectra: carbon dioxide – rare gas mixtures // J. Quant. Spectr. Radiat. Transf., Vol. 196, 2017. pp. 87-93.

Диссертация «Спектроскопические проявления динамики молекулярных столкновений в системах линейная молекула – атом» Опарина Даниила Владимировича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

Проект заключения принят на заседании экспертной группы, сформированной решением декана факультета от 11.04.2017 № 12 в составе 3 чел.

Присутствовало на заседании 12 чел. Результаты голосования: «за» - 12 чел., «против» - нет, «воздержался» - нет, протокол № 1 от « 12 » апреля 2017 г.



(подпись председателя экспертной группы)

(Бурейко Сергей Федорович)

(доктор физико-математических наук, профессор,
кафедра молекулярной спектроскопии СПбГУ,
профессор)