

ОТЗЫВ на автореферат диссертации Мальцева Максима Александровича «Двухатомные соединения аргона в равновесной низкотемпературной плазме», представленной на соискание ученой степени кандидата физико–математических наук по специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

Диссертация Мальцева Максима Александровича посвящена разработке комплексного подхода, позволяющего с высокой точностью рассчитывать термодинамические функции двухатомных соединений с аргоном и предсказывать концентрации аргидов, образующихся в индуктивно-связанной плазме современных масс-спектрометров.

Фундаментальная значимость и актуальность диссертационной работы определяется отсутствием в научной литературе данных об исследованиях соединений аргона с использованием многоконфигурационных методов квантовой химии. Важным прикладным аспектом данного исследования является повышение общей точности масс-спектрометрического анализа за счет надежного термодинамического моделирования плазмы, содержащей в качестве фоновых ионов двухатомные соединения аргона.

Автором последовательно решен ряд задач, начиная от высокоуровневого расчета потенциальных кривых для основного и возбужденных электронных состояний ArN и ArN^+ и вычисления их термодинамических функций, и заканчивая тестированием предложенной методики для предсказания концентрации аргидов в индуктивно–связанной плазме.

Основные результаты работы отражены в публикациях в рецензируемых научных журналах, а также прошли широкую апробацию на всероссийских и международных научных конференциях.

При ознакомлении с текстом автореферата вызывало сомнение использование автором термина «энергетическая структура» применительно к молекулам и ионам. Также из текста не вполне ясно, каким образом были

вычислены спин–орбитальные и спин–спиновые поправки к потенциальной энергии (Рис. 2). Высказанные замечания никоим образом не снижают значимость полученных результатов и общее положительное впечатление о работе.

Работа соответствует требованиям, установленным п.9 «Положения о присуждении учёных степеней» (постановление Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г.), предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата наук, а автор работы М.А. Мальцев достоин присуждения учёной степени кандидата физико–математических наук по специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника.

Отлётов Арсений Андреевич

кандидат химических наук по специальности

02.00.04 – Физическая химия

Старший научный сотрудник

Лаборатория квантово–химических расчетов

Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н.

Семенова Российской академии наук

ФИЦ ХФ РАН

ул. Косыгина, д. 4, корпус 1, каб. 75/3

Телефон: +7 495 939 71 87

E-mail: arseniy_otlyotov@chph.ras.ru

Отлётов А.А.

Дата составления отзыва: 10 сентября 2023 г.

Подпись Отлётова А.А. удостоверяю
Ученый секретарь ФИЦ ХФ РАН Лагунов М.Н.