

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о работе Мальцева Максима Александровича

по диссертации «Двухатомные соединения аргона в равновесной низкотемпературной плазме», представленной к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

Диссертация Мальцева М.А. на тему: «Двухатомные соединения аргона в равновесной низкотемпературной плазме» посвящена развитию и применению теоретического метода расчета термодинамических свойств двухатомных молекул в газовой фазе «из первых принципов», т.е. без непосредственного использования экспериментальных данных. Данный метод основан на расчете потенциала межатомного взаимодействия с применением современных методов квантовой химии, решения стационарного уравнения Шредингера для определения колебательно-вращательного спектра молекулы с учетом основного и возбужденных электронных состояний молекулы, определения статистической суммы и зависимостей основных термодинамических функций от температуры, аппроксимации полученных данных для представления их в виде функциональной зависимости, пригодной для добавления в термодинамические базы данных и использования в термодинамическом моделировании.

Представленная работа представляет несомненный практический и теоретический интерес, так как многие химические соединения, в том числе двухатомные соединения аргона, не могут на данный момент с достаточной точностью исследованы экспериментально, однако они возникают в плазме газовых разрядов, в астрофизических объектах и др.

Наибольший практический интерес здесь связан с оценкой концентрации ионов аргидов в индуктивно-связанной плазме, используемой в современных масс-спектрометрах. Выявление этих ионов и уменьшение их влияния на результаты измерений представляет собой проблему, которая уже долгое время стоит перед экспериментаторами. Работа Мальцева М.А. является первым шагом к ее решению, в частности, в диссертации показана возможность моделирования состава индуктивно-связанной плазмы на основе разработанных методов, дающая неплохое согласие с имеющимися экспериментальными данными. Кроме того, работа Мальцева М.А. существенно расширяет арсенал средств для пополнения и уточнения современных термодинамических баз данных (например, развиваемой в ОИВТ РАН информационной системы ИВТАНТЕРМО), широко используемых в различных областях физики и химии низкотемпературно плазмы.

В процессе работы над диссертацией Мальцевым М.А. был разработан алгоритм и комплекс программ, включая модули для аппроксимации межатомных потенциалов межатомного взаимодействия, расчета внутренней статистической суммы и зависимостей основных термодинамических функций от температуры. С помощью этих программ и дополнительных теоретических расчетов были получены следующие результаты:

а) исследовано применение различного типа модельных потенциалов межатомного взаимодействия, включая потенциал Морзе, расширенный потенциал Морзе, электростатический потенциал, модель «жесткий ротатор – гармонический осциллятор» и другие, для описания основного и возбужденных электронных состояний двухатомных соединений аргона;

б) проведен расчет потенциальных кривых межатомного взаимодействия нитридов аргона ArN и ArN^+ на основе квантово-химического моделирования с учетом спин-орбитального и спин-спиновых взаимодействий;

в) рассчитаны термодинамические функции двухатомных соединений аргона ArV^+ , ArCo^+ , Ar^{+2} , Ar_2 , ArO^+ , ArO , ArN^+ , ArN , ArH^+ , ArH в диапазоне температур от 300 до 10^4 К, представленные в функциональном виде, необходимом для использования их в термодинамической базе данных ИВТАНТЕРМО;

г) для каждого из указанных соединений определены энтальпии образования при нормальных условиях;

д) определены погрешности расчета термодинамических функций, связанные с неточностью расчета и аппроксимации потенциальной кривой межатомного взаимодействия;

е) проведено термодинамическое моделирование равновесного состава индуктивно-связанной плазмы, используемой в современных масс-спектрометрах, результаты которого хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными, что подтверждает корректность предложенного в работе метода.

За время работы аспирантом было выполнено 23 доклада на всероссийских и международных конференциях, опубликовано 8 статей в рецензируемых научных изданиях по материалам проделанной работы, из которых 6 входя в Перечень ВАК РФ.

При выполнении диссертационной работы автор работы проявил себя самостоятельным исследователем в области термодинамики низкотемпературной плазмы, вычислительной физики и квантовой химии, продемонстрировал высокий уровень владения современными компьютерными технологиями и средствами программирования. Мальцев М.А. на протяжении трех лет является ассистентом кафедры общей физики МФТИ, где проводит семинары и лабораторный практикум для студентов.

В целом следует отметить, что Мальцев М.А. является квалифицированным научным работником и бесспорно достоин присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности «1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника».

Заведующий лабораторией № 1.6 ОИВТ РАН

д.ф.-м.н.


И.В. Морозов

Учёный секретарь ОИВТ РАН

д.ф.-м.н.


А.Д. Киверин

