

Рецензия

выпускной квалификационной работы на соискание степени бакалавра по направлению «Физика» Онищенко С.С. «Ван дер Ваальсовы комплексы N_2I_2 »

Экспериментальные и теоретические исследование ван-дер-ваальсовых (ВДВ) комплексов важны для решения многих задач современной молекулярной физики. Интерес к изучению ВДВ комплексов, с одной стороны, вызван тем, что они оказались идеальными модельными системами для понимания динамики переноса энергии. С другой стороны, эти комплексы рассматриваются как удобные модельные системы для исследования слабосвязанных межмолекулярных взаимодействий.

Простейшие ВДВ комплексы состоят из атома инертного газа (Rg – rare gas) и двухатомной молекулы, в том числе системы Rg-дигалоген ($RgHal_2$). Исследованиям $RgHal_2$ в основных электронных и первых возбужденных валентных состояниях посвящены десятки экспериментальных и теоретических работ; спектральные характеристики и динамика этих комплексов хорошо изучены. Из-за экспериментальных сложностей и трудностей неэмпирических расчетов комплексы дигалогенов, в частности RgI_2 в так называемых ионно-парных (ИП) состояниях, $RgI_2(IP)$, практически не были исследованы вплоть до 2016 г., когда была опубликована первая из серии статей, выполненных в научной группе проф. А.М. Правилова. Ими исследованы комплексы RgI_2 , $Rg = He, Ne, Ar, Kr$, в валентных и ИП состояниях.

Большой интерес представляют комплексы молекул галогенов с молекулярными партнерами, поскольку в таких комплексах может иметь место более сильная, чем ВДВ, галогенная связь (ГС). Комплексы с ГС исследовались вплоть до настоящего времени только в основных электронных состояниях.

Рецензируемая работа посвящена изучению комплекса N_2I_2 в валентных и ИП состояниях. До ее постановки данные об этом комплексе ограничивались сведениями, полученными при исследовании $N_2I_2(X0_g^+, B0_u^+)$ и N_2I_2 в ридберговских состояниях.

В данной работе использовался метод лазерной люминесцентной спектроскопии при двухступенчатом возбуждении ВДВ комплексов в импульсных сверхзвуковых молекулярных пучках. Измерены спектры возбуждения люминесценции ИП состояний при двухступенчатом заселении $N_2I_2(E0_g^+, v_E=19, n_E)$ (n_E – ВДВ моды), спектры действия, спектры люминесценции ИП состояний с разрешением, позволяющим определить заселенности колебательных уровней ИП состояний, временные зависимости интенсивности люминесценции, позволяющие произвести отнесение ИП состояний.

Показано, что в исследованном диапазоне энергий возбуждения обнаруживается единственное ИП состояние, а именно, $I_2(D'_g)$; состояния $I_2(D0_u^+, \beta 1g, E0_g^+)$, образование которых энергетически возможно, не обнаружены. Т.о., наиболее вероятным каналом распада $N_2I_2(E0_g^+, v_E=19, n_E)$ является его электронная преддиссоциация (ЭП) на $N_2 + I_2(D'_g)$; другие каналы распада, в том числе колебательная преддиссоциация (КП) на $N_2 + I_2(E0_g^+, v_E)$ имеют много меньшую вероятность. Эти особенности сильно отличают комплекс N_2I_2 от RgI_2 . Анализ спектров возбуждения позволил определить константы ω_e и $\omega_e x_e$ комплекса $N_2I_2(E0_g^+, v_E=19, n_E)$, а анализ заселенности колебательных уровней $I_2(D'_g)$ – энергии связи комплекса в основном $X0_g^+$, промежуточном $B0_u^+$, а также $E0_g^+$ состояниях; в первых двух – со значительной меньшей, чем ранее, погрешностью. Из факта наличия только одного канала ЭП на $N_2 + I_2(D'_g)$ и на основании проведенных ранее расчетов энергии диссоциации $N_2I_2(\tilde{X})$ установлено, что основное состояние комплекса соответствует конфигурациям *twist*, либо *parallel*. Показано, что энергия связи

$N_2I_2(E0_g^+, v_E=19, n_E=0)$ лишь немного превышает таковую для $ArI_2(E0_g^+, v_E=19, n_E=0)$, что коррелирует с небольшой разницей в поляризуемости $N_2(X)$ и Ar .

Все приведенные в ВКР данные, за исключением энергий связи комплекса в основном $X0_g^+$ и промежуточном $B0_u^+$ состояниях, получены впервые.

Хотел бы отметить следующие недостатки работы:

1. Во введении написано, что одной из задач работы является построение на основе полученных данных модели для описания динамики данной системы при возбуждении комплекса в ИП состояние, а в выводах утверждается, что эта задача решена. На самом деле, установлено только, что основное состояние комплекса соответствует конфигурациям *twist*, либо *parallel*.

2. Работа написана легким и в то же время грамотным языком, легко читается, ее выводы в достаточной степени автором обоснованы. На этом фоне некоторые неудачные выражения, например, «...слабосвязанных молекулярных взаимодействий» (стр.3), или «Это даёт возможность образованию устойчивому существованию комплексов и созданию возможностей для...» (стр. 11) не снижают общего положительного впечатления.

3. К списку цитированных работ можно было бы подойти более внимательно. Так, ссылка 18 «Фотопроцессы-в-молекулярных-газах-Pravilov(1).pdf.», наверное, должна иметь другой вид.

Отмеченные недостатки не снижают общей высокой оценки на отлично работы Онищенко Софии Сергеевны, которая, несомненно, заслуживает присуждения степени бакалавра по направлению «Физика».

05.06.2018.

Рецензент доктор физ.-мат наук, профессор
Иванов В.А. / 