

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

Диссертационная работа Мальцева М.А. посвящена изучению термодинамических свойств двухатомных аргидов, образующихся в аргоновой плазме. Актуальность работы обусловлена необходимостью повышения точности методов детектирования более тяжелых веществ в масс-спектрометрических экспериментах в присутствии аргона из-за возможного перекрывания ионных пиков, так как до настоящего времени масс-спектрометрия остается активно используемым инструментом научных исследований в физической, неорганической и аналитической химии.

В диссертации Мальцева М.А. теоретически исследуется влияние двухатомных соединений аргона на равновесный состав плазмы, которая используется в качестве ионного источника в масс-спектрометрических экспериментах. В качестве метода расчета равновесного состава плазмы использовано термодинамическое моделирование. Для того, чтобы в результате расчетов получались результаты, представляющие практический интерес, значения термодинамических функций должны определяться с максимально возможной точностью. Так как ранее свойства двухатомных аргидов не определялись, получение соответствующей информации в широком диапазоне температур, несомненно, важно для практики.

В работе Мальцева М.А. для решения поставленной задачи использован аппарат квантовой химии, с помощью которого удалось оценить энергии межатомного взаимодействия в широком диапазоне межъядерных расстояний и энергий электронного возбуждения. Это позволило получить информацию об электронно-колебательно-вращательных спектрах молекул при отсутствии достоверных экспериментальных данных, а рассчитанные таким образом термодинамические функции использованы далее при расчете равновесного состава индуктивно-связанной плазмы при атмосферном давлении. Анализ рассчитанных значений состава плазмы показал хорошее совпадением с экспериментальными данными для холодного режима ее работы.

Результаты, полученные в работе Мальцева М.А., можно использовать при изучении теплофизических процессов в низкотемпературной плазме, а также для корректной интерпретации результатов масс-спектрометрических измерений в присутствии газа аргона.

Автореферат достаточно полно отражает содержание диссертации, обосновывает актуальность, новизну и практическую значимость работы. Текст автореферата написан хорошим научным языком, содержит необходимые иллюстрации.

Работа прошла хорошую апробацию, неоднократно докладывалась автором на российских и международных конференциях, результаты диссертации опубликованы в виде 6-ти статей в рецензируемых научных журналах.

По содержанию автореферата можно сделать следующее замечание:

в части работы, касающейся аппроксимация потенциальных кривых, из текста автореферата не вполне понятно, какими критериями руководствовался автор при выборе той или иной модели, как оценивалось достаточное число параметров моделей.

Это замечание не снижает общей значимости диссертационной работы. Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013 г., ред. 07.06.2021 г., а ее автор Мальцев Максим Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

Доктор хим. наук, профессор,
заведующий лабораторией химической термодинамики
химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова

Успенская Ирина Александровна

02.10.2023

Телефон: +7 (495) 939-12-05

E-mail: ira@td.chem.msu.ru

Адрес: 119991, Москва, Ленинские горы, дом 1,
строение 3, ГСП-1, МГУ, химический факультет

