

Отзыв на автореферат диссертации Махнева Владимира Юрьевича «**ВЫСОКОТОЧНЫЕ КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СИСТЕМЫ HCN/HNC**», представленной на соискание степени кандидата физико – математических наук.

Инфракрасный спектр системы HCN/HNC был предметом многочисленных теоретических и экспериментальных исследований в последние годы и продолжает представлять большой интерес как для молекулярной спектроскопии, так и для астрономии. Относительная простота системы HCN/HNC делает ее идеальным кандидатом для тестирования новых моделей расчета вращательных, колебательных и электронных переходов, которые могут быть затем распространены на более сложные молекулы. HCN и HNC также представляют астрофизический интерес, поскольку их спектральные линии наблюдаются в кометах, молекулярных облаках, атмосферах планет и углеродных звезд. Для интерпретации астрофизических наблюдений необходима высокоточная информация о колебательно – вращательном спектре молекул HCN и HNC в широком спектральном диапазоне.

В связи с вышесказанным тема диссертации Махнева В.Ю. представляется актуальной. В настоящее время в канонических спектральных базах HITRAN и GEISA все большее распространение получают так называемые эмпирические списки спектральных линий, которые представляют собой комбинацию экспериментальных данных и высокоточных вариационных предсказаний. Эмпирические списки линий дают детальную картину спектра – от микроволн до видимой области, что также позволяет трансформировать высокоточный расчет на высокие температуры, необходимые для астрофизических исследований. Поэтому, несомненно, одним из важнейших результатов, представленных в диссертации, являются высокоточные списки центров и интенсивностей колебательно – вращательных переходов молекул HCN и HNC, полученные с использованием *ab initio* и вариационных расчетов. Эти списки линий являются наиболее точными и полными среди существующих и успешно используются для идентификации экспериментальных спектров.

Диссертация выполнена в сотрудничестве с международным коллективом, который является признанным лидером в высокоточных *ab initio* и вариационных расчетах молекулярных спектров. Потребителем этих расчетов является в том числе и Институт оптики атмосферы. Нет никаких сомнений в достоверности основных выводов и результатов диссертации. Ее содержание достаточно полно отражено в представленных публикациях.

В качестве замечания следует отметить, что в автореферате практически отсутствует иллюстративный материал, что затрудняет восприятие текста. В списке литературных источников в автореферате нет, например, упоминания о работе R.J. Barber et al., MNRAS, 2014, V. 437, P. 1828–1835, где представлены списки колебательно – вращательных линий

молекул HCN и HNC, и не приведено сравнение полученных расчетных списков линий с данной работой.

Считаю, что диссертация Махнева В.Ю. соответствует всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а соискатель Махнев В.Ю. заслуживает присвоения ему искомого звания кандидата физико – математических наук.

С.н.с. Лаборатории теоретической  
спектроскопии ИОА СО РАН,  
к. ф.-м.н.



О.В. Науменко

Подпись Науменко О.В. заверяю,  
Ученый секретарь ИОА СО РАН,  
к. ф.-м.н.



О.В. Тихомирова

28 сентября 2021 г.