

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.069.02 НА БАЗЕ  
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО НАУЧНОГО  
УЧРЕЖДЕНИЯ «ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР  
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКИ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК» ПО  
ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 14.10.2019 № 96

О присуждении Кюберис Александре Александровне, гражданке РФ,

ученой степени кандидата физико-математических наук

Диссертация «Колебательно-вращательные спектры малых молекул: высокоточные расчеты методами квантовой химии» по специальности 01.04.03 – радиофизика принята к защите 30 мая 2019 г., протокол № 86, диссертационным советом Д 002.069.02 на базе Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук» (ИПФ РАН), 603950, Нижний Новгород, ул. Ульянова, 46, приказ ФАНО №334 от 30.06.2015.

Соискатель, Кюберис Александра Александровна, 1990 года рождения, в 2013 году окончила ННГУ им. Н.И. Лобачевского, работает младшим научным сотрудником в ИПФ РАН.

Диссертация выполнена в отделе микроволновой спектроскопии ИПФ РАН. Научный руководитель – кандидат физико-математических наук Полянский Олег Львович, ведущий научный сотрудник ИПФ РАН.

Официальные оппоненты, Вигасин Андрей Алексеевич, доктор физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник Института физики атмосферы им. А.М. Обухова, и Столяров Андрей Владиславович, доктор физ.-мат. наук, заведующий кафедрой лазерной химии Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация, ФГБУН «Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН» (г. Томск), в своем положительном заключении, подписанном главным

научным сотрудником д.ф.-м.н. Быковым Александром Дмитриевичем и утвержденном директором Института д.ф.-м.н. Пташником Игорем Васильевичем, указала, что диссертация А.А. Кюберис является законченной научно-квалификационной работой, вносящей значительный вклад в развитие перспективного научного направления, предполагающего использование неэмпирических методов для пополнения спектроскопических баз данных. Автор заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.03 – радиофизика.

Соискатель имеет 13 публикаций по теме диссертации: 4 статьи в рецензируемых научных изданиях, 9 публикаций в сборниках тезисов и трудов всероссийских и международных конференций. Наиболее значимыми работами являются:

1. Polyansky O.L., Ovsyannikov R.I., Kyuberis A.A. et al. Calculation of rotation-vibration energy levels of the water molecule with near-experimental accuracy based on an ab initio potential energy surface // JPCA, 2013. V. 117, P. 9633-9643.
2. Kyuberis A.A., Lodi L., Zobov N.F., Polyansky O.L. Ab initio calculations of the ro-vibrational spectrum of  $\text{H}_2\text{F}^+$  // JMS. 2015. Vol.327, P.38-44.
3. Polyansky O.L., Ovsyannikov R.I., Kyuberis A.A. et al. Calculation of rotation-vibration energy levels of the ammonia molecule based on an ab initio potential energy surface // JMS. 2016. V.327, P.21-30.
4. Polyansky O.L., Kyuberis A.A., Lodi L, et al. ExoMol molecular line lists XIX: high accuracy computed line lists for  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  and  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ // Mon. Not. R. Astr. Soc. 2017. Vol. 466, P. 1363-1371.

На диссертацию и автореферат поступило 7 отзывов. Все отзывы положительные. В них отмечаются актуальность диссертации, научная новизна и практическая значимость полученных результатов.

В положительном отзыве ведущей организации, наряду со стилистическими, сделаны следующие замечания: 1) в диссертации имеются спорные утверждения, в частности, на стр.33 сказано, что точность финальной поверхности потенциальной энергии (ППЭ) итерационно улучшается за счет точек, которые исключаются из процедуры оптимизации; 2) непонятно, какую асимптотику

научным сотрудником д.ф.-м.н. Быковым Александром Дмитриевичем и утвержденном директором Института д.ф.-м.н. Пташником Игорем Васильевичем, указала, что диссертация А.А. Кюберис является законченной научно-квалификационной работой, вносящей значительный вклад в развитие перспективного научного направления, предполагающего использование неэмпирических методов для пополнения спектроскопических баз данных. Автор заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.03 – радиофизика.

Соискатель имеет 13 публикаций по теме диссертации: 4 статьи в рецензируемых научных изданиях, 9 публикаций в сборниках тезисов и трудов всероссийских и международных конференций. Наиболее значимыми работами являются:

1. Polyansky O.L., Ovsyannikov R.I., Kyuberis A.A. et al. Calculation of rotation-vibration energy levels of the water molecule with near-experimental accuracy based on an ab initio potential energy surface // JPCA, 2013. V. 117, P. 9633-9643.
2. Kyuberis A.A., Lodi L., Zobov N.F., Polyansky O.L. Ab initio calculations of the ro-vibrational spectrum of  $\text{H}_2\text{F}^+$  // JMS. 2015. Vol.327, P.38-44.
3. Polyansky O.L., Ovsyannikov R.I., Kyuberis A.A. et al. Calculation of rotation-vibration energy levels of the ammonia molecule based on an ab initio potential energy surface // JMS. 2016. V.327, P.21-30.
4. Polyansky O.L., Kyuberis A.A., Lodi L, et al. ExoMol molecular line lists XIX: high accuracy computed line lists for  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  and  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ // Mon. Not. R. Astr. Soc. 2017. Vol. 466, P. 1363-1371.

На диссертацию и автореферат поступило 7 отзывов. Все отзывы положительные. В них отмечаются актуальность диссертации, научная новизна и практическая значимость полученных результатов.

В положительном отзыве ведущей организации, наряду со стилистическими, сделаны следующие замечания: 1) в диссертации имеются спорные утверждения, в частности, на стр.33 сказано, что точность финальной поверхности потенциальной энергии (ППЭ) итерационно улучшается за счет точек, которые исключаются из процедуры оптимизации; 2) непонятно, какую асимптотику

имеет правая часть (1.23) при удалении одного из атомов на бесконечное расстояние.

Положительный отзыв официального оппонента д.ф.-м.н. А.А. Вигасина содержит, наряду со стилистическими и редакционными, следующие замечания: 1) в работе практически не обсуждается обоснование выбора функциональной формы даже для наиболее важных по своей величине поправок; 2) в литературе были предложены различные функциональные выражения для экстраполяции результатов расчета *ab initio* к бесконечному базису. Насколько сделанный автором выбор является оптимальным? 3) Автор практически ничего не говорит о точности решения ядерного уравнения Шредингера; 4) вычисленные величины равновесных длин межатомных связей приводятся в диссертации с точностью до  $10^{-5}$  Å. Есть ли смысл в такой точности?

Положительный отзыв официального оппонента д.ф.-м.н. А. В. Столярова содержит замечания: 1) каким образом по результатам квантовохимических расчетов, полученных для 3-х и 4-х атомных гидридов с числом атомов водорода от 2 до 3 и числом электронов не больше 10, можно судить о точности расчетов произвольной 3-5 атомной молекулы с общим числом электронов до 20? 2) На основании каких тестовых расчетов было выбрано оптимальное активное пространство для методов МКССП и КВ? Почему для расчета динамической корреляции не был выбран метод функционала усредненных связанных пар (MR-ACPF) и другие возможные методы?; 3) Почему и где именно в исследуемых молекулах перестает работать метод “золотого стандарта” квантовой химии (CCSD(T))? 4) Учитывалась ли в работе так называемая суперпозиционная ошибка базисного набора и какова абсолютная погрешность используемой схемы экстраполяции к бесконечному базисному набору? 5) В двухатомных молекулах неадиабатические сдвиги энергий пропорциональны величине кинетической энергии колебаний и вращения. Наблюдаются ли аналогичные закономерности в многоатомных молекулах?

В положительном отзыве на автореферат к.ф.-м.н. С.Н. Михайленко (Институт оптики атмосферы им. В.Е.Зуева СО РАН, г. Томск) сделаны замечания: 1) трудно согласиться с тем, что экспериментальная точность измерений по спектрам

высокого разрешения составляет порядка  $10^{-2}$   $\text{см}^{-1}$ ; 2) утверждение, что предсказанная частота перехода при точности расчетов в  $0.1$   $\text{см}^{-1}$  окажется в пределах контура экспериментально наблюдаемой линии, является неверным для лабораторных спектров, зарегистрированных при низких давлениях; 3) что может означать фраза на стр. 6 о достижении точности эксперимента  $10^{-2}$   $\text{см}^{-1}$  без использования данных эксперимента? 4) В положениях, выносимых на защиту, говорится о колебательно-вращательных (КВ) уровнях, хотя из текста следует, что речь идет о колебательных уровнях. В положительном отзыве на автореферат к.ф.-м.н. доцента Р.Е. Асфина (СПГБУ, г. Санкт-Петербург) содержится, наряду с редакционным, замечание: утверждение автора, что единственный вариант повышения точности расчета – это применение метода экстраполяции к полному базисному набору, слишком категорично, другим вариантом может быть разработка своих базисных наборов. Положительный отзыв на автореферат к.ф.-м.н. О.В. Науменко (Институт оптики атмосферы им. В.Е.Зуева СО РАН, г. Томск) содержит замечание об отсутствии в тексте иллюстративного материала и ссылок на некоторые работы, приведенные в списке литературы. Положительный отзыв на автореферат д.ф.-м.н., профессора В.Г. Тютерева (Реймский университет, г. Реймс, Франция) содержит замечания, касающиеся чрезмерной общности некоторых формулировок, в частности, положения, в котором говорится о применимости развитого подхода к молекулам с большим числом атомов и электронов, чем у исследованных в диссертации.

На все вопросы и замечания, содержащиеся в отзывах, А.А. Кюберис были даны удовлетворительные ответы и комментарии.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обоснован тем, что оппоненты являются признанными высококвалифицированными специалистами в области радиофизики, спектроскопии и квантовой химии, а одним из направлений деятельности ведущей организации является спектроскопия внутримолекулярных взаимодействий и воды от мономера до воды в биосистемах.

**Диссертационный совет отмечает**, что на основании выполненных соискателем исследований:

- Создана новая *ab initio* ППЭ для молекулы воды  $\text{H}_2\text{O}$ . В диапазоне до  $15000\text{ см}^{-1}$  впервые достигнута близкая к экспериментальной точность *ab initio* расчета КВ уровней энергии для пяти основных изотопологов молекулы воды;
- Получена новая *ab initio* ППЭ для молекулы  $\text{H}_2\text{F}^+$ . Достигнутая точность описания фундаментальных частот иона  $\text{H}_2\text{F}^+$  в 30 раз превышает результат всех предшествующих *ab initio* расчетов и сравнима с экспериментальной;
- Сконструирована наиболее точная на настоящий момент *ab initio* ППЭ для молекулы аммиака, которая позволяет производить предсказания КВ переходов с недостижимой ранее точностью для *ab initio* расчетов;
- Впервые рассчитаны наиболее полные и точные на сегодняшний день списки КВ линий для молекул  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ .

**Теоретическая значимость исследования** заключается в том, что *ab initio* расчет КВ уровней энергии малых молекул с точностью порядка  $0.1\text{ см}^{-1}$  открывает путь к решению целого ряда проблем, возникающих в астрофизических исследованиях, в различных направлениях физики атмосферы.

**Практическая значимость работы** связана с тем, что КВ энергетические уровни ионов и молекул, рассчитанные в работе с высокой точностью, необходимы для интерпретации спектров высокого разрешения.

**Оценка достоверности результатов исследования** обеспечивается применением апробированных методов расчетов и подтверждается совпадением результатов расчетов энергетических уровней с экспериментальными данными и работами других авторов. Результаты диссертации опубликованы в ведущих рецензируемых российских и зарубежных научных журналах, докладывались на международных и всероссийских конференциях.

**Личный вклад соискателя** состоит в постановке задачи, последовательном учете различных поправок к приближению Борна-Оппенгеймера для высокоточных *ab initio* расчетов уровней энергии малых молекул. Совместно с коллективом лаборатории участвовала в *ab initio* расчетах уровней энергии молекулы воды с учетом различных тонких эффектов. Основной объем результатов, сформулированных в Главах 3, 4 диссертационной работы, получен либо самим автором, либо при ее непосредственном участии.

На заседании от 14.10.2019 г. диссертационный совет принял решение присудить Кюберис А.А. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 26 человек, из них 10 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 31 человека, входящего в состав совета, проголосовали: за – 26, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель диссертационного совета  
академик РАН



*А.Г. Литвак*  
А.Г. Литвак

Ученый секретарь диссертационного совета  
доктор физ.-мат. наук

*Э.Б. Абубакиров*

Э.Б. Абубакиров

14 октября 2019 г.