

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.238.01 (Д
002.069.02), СОЗДАННОГО 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 04.10.2021 №134

О присуждении Махневу Владимиру Юрьевичу, гражданину РФ, учёной
степени кандидата физико-математических наук

Диссертация «Высокоточные квантовохимические расчеты спектров
молекулярной системы HCN/HNC» по специальности 01.04.03 Радиофизика
принята к защите 24.06.2021 г., протокол №130, диссертационным советом
Д 002.069.02, созданным на базе Федерального государственного
бюджетного научного учреждения (ФГБНУ) «Федеральный
исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии
наук» (ИПФ РАН), 603950, Нижний Новгород, ул. Ульянова, 46, приказ
561/нк от 09.11.2012 г.

Соискатель, Махнев Владимир Юрьевич, 1992 года рождения, в 2015 году
окончил ННГУ им. Н.И. Лобачевского, в 2019 году окончил аспирантуру
ИПФ РАН, работает младшим научным сотрудником в ИПФ РАН.

Научный руководитель: Полянский Олег Львович, кандидат физ.-мат. наук,
ведущий научный сотрудник отдела 380 ИПФ РАН.

Официальные оппоненты, Вигасин Андрей Алексеевич, доктор физ.-мат.
наук, ведущий научный сотрудник Института физики атмосферы им. А.М.
Обухова РАН и Краснощеков Сергей Вадимович, доктор физ.-мат. наук,
ведущий научный сотрудник химического факультета МГУ им. М.В.

Ломоносова, дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация, ФГБУН Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева РАН, в своем положительном заключении, подписанным доктором физ.-мат. наук, главным научным сотрудником Быковым Александром Дмитриевичем и утвержденным директором ФГБУН ИОА РАН, доктором физ.-мат. наук, Пташником И.В., указала, что диссертация В.Ю. Махнева соответствует всем критериям п. 9 действующего «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемых к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.03 – радиоп физика.

Соискатель имеет по теме диссертации 15 опубликованных работ, 4 из которых опубликованы в рецензируемых научных журналах. Наиболее значимыми работами являются:

1. Mizus I. I., Kyuberis A. A., Zobov N. F., Makhnev V. Y., Polyansky O. L., Tennyson J. High-accuracy water potential energy surface for the calculation of infrared spectra // *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2018. V. 376, № 2115. P. 20170149.
2. Makhnev V. Y., Kyuberis A. A., Zobov N. F., Lodi L., Tennyson J., Polyansky O. L. High accuracy ab initio calculations of rotation-vibration energy levels of the HCN/HNC system // *J. Phys. Chem. A*. 2018. V. 122. P. 1326-1343.
3. Makhnev V. Y., Kyuberis A. A., Polyansky O. L., Mizus I. I., Tennyson J., Zobov N. F. A new spectroscopically-determined potential energy surface and ab initio dipole moment surface for high accuracy HCN intensity calculations // *J. Mol. Spectrosc.* 2018. V. 353. P. 40-53.
4. Mellau G. C., Makhnev V. Y., Gordon I. E., Zobov N. F., Tennyson J., Polyansky O. L. An experimentally-accurate and complete room-temperature infrared HCN line-list for the HITRAN database // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* 2021. P. 107666.

На диссертацию и автореферат получено 6 отзывов. Все отзывы положительные, в них отмечаются актуальность диссертации, научная новизна и практическая значимость полученных результатов.

Положительный отзыв ведущей организации содержит, наряду с редакционными, замечание об отсутствии упоминания метода определения констант оптимизированной поверхности.

Положительный отзыв официального оппонента, д.ф.-м.н. Вигасина А.А. содержит, помимо редакционных, замечание: ряд теоретических вопросов, относящихся к теме диссертации, таких, как оценки вкладов величин из формулы (4.3), связанных со статическим дипольным моментом молекулы HCN и эффектом Кориолиса, не получили должных комментариев.

Положительный отзыв официального оппонента, д.ф.-м.н. Краснощекова С.В. содержит, помимо стилистических и редакционных, замечания о недостатке ссылок на определенные работы по расчетам классических нежестких молекул; о неиспользованной возможности применения полиадных квантовых чисел; о недостаточности обсуждения достоинств использованного вариационного метода.

Положительный отзыв на автореферат д.ф.-м.н. Тютерева В.Г. содержит замечание, касающееся процедуры определения параметров неадиабатической поправки, использованной для получения одного из результатов. Положительный отзыв на автореферат к.ф.-м.н. Науменко О.В. содержит замечание, отмечающее недостаток иллюстративного материала и отсутствие ссылки на предшествующий список линий (Barber и др., MNRAS, 2014). Положительный отзыв на автореферат к.ф.-м.н. Юрченко С.Н. замечаний не содержит.

Выбор официальных оппонентов обоснован тем, что они являются признанными специалистами в области спектроскопии высокого разрешения, а ведущая организация является одним из лидеров в области инфракрасной теоретической и экспериментальной спектроскопии.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- ранее разработанный подход для расчетов *ab initio* колебательно-вращательных уровней энергии расширен на 14-электронную молекулярную систему HCN/HNC. В результате была построена новая *ab initio* поверхность потенциальной энергии (ППЭ) с точностью на порядок превышающей точность предыдущих расчетов уровней энергии. Достигнутое среднеквадратичное отклонение уровней энергии HCN до 7800 см^{-1} от экспериментальных данных составляет $\approx 0.3 \text{ см}^{-1}$;
- методом добавочной поверхности к полученной *ab initio* ППЭ построена новая ППЭ, оптимизированная с использованием экспериментальных данных. Уровни энергии молекул HCN и HNC в диапазоне энергий до 7800 см^{-1} воспроизведены с рекордной точностью $\sigma=0.037 \text{ см}^{-1}$ и $\sigma=0.27 \text{ см}^{-1}$ соответственно;
- на основе применённого в данной работе подхода построена поверхность дипольного момента молекулы HCN и проведены расчёты интенсивностей переходов в частотном диапазоне от 0 до 8000 см^{-1} . Для полос, отвечающим двум из трех фундаментальных колебаний молекулы, результаты расчетов с использованием оптимизированной ППЭ соответствуют экспериментальным данным с отклонением не более 1%. Для других колебательных полос достигнуто улучшение описания интенсивностей переходов по сравнению с предшествующими расчётами;
- рассчитаны списки линий молекулы HCN и её изотополога H^{13}CN в диапазоне от 0 до 8000 см^{-1} с погрешностью вычисления частот порядка 0.03 см^{-1} и погрешностью описания интенсивностей основных переходов в несколько процентов, что позволило идентифицировать все экспериментально наблюдаемые переходы, соответствующие колебательно-вращательным уровням энергии вплоть до 10300 см^{-1} .

Практическая значимость работы заключается в применении полученных данных для анализа высокоточных спектров для частот вплоть до ближнего

ИК-диапазона. Созданный список линий может быть использован для анализа лабораторных и атмосферных спектров, а также для спектров космических объектов, в т.ч. экзопланет. Результаты работы будут включены в новое издание спектроскопической базы HITRAN2020.

Достоверность полученных результатов обеспечивается изложенными в работе многочисленными сравнениями теоретически рассчитанных спектров с экспериментальными данными, как хорошо известными, так и новыми, полученными на современных экспериментальных установках.

Личный вклад соискателя: все приведенные в диссертации результаты получены либо лично автором, либо при его непосредственном участии. Автором рассчитаны электронные энергии, построены поверхности потенциальной энергии и дипольного момента и проведена их оптимизация, составлены списки линий, проанализированы и систематизированы источники экспериментальных данных.

На все вопросы и замечания, высказанные в ходе защиты и содержащиеся в отзывах, В.Ю. Махневым были даны ответы и комментарии.

На заседании от 04.10.2021 г. диссертационный совет принял решение: за решение научной задачи, имеющей значение для развития соответствующей отрасли знаний, присудить Махневу В.Ю. учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 25 человек, из них 9 докторов наук по специальности 01.04.03, участвовавших в заседании, из 31 человека, входящего в состав совета, проголосовали: за - 24, против - нет, недействительных бюллетеней - 1.

Председатель диссертационного совета,
академик РАН

Литвак Александр Григорьевич

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физ.-мат. наук

Абубакиров Эдуард Булатович

«04» октября 2021 г.

