

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Кюберис Александры Александровны «Колебательно – вращательные спектры малых молекул: высокоточные расчеты методами квантовой химии», представленной на соискание ученой степени кандидата физико – математических наук по специальности 01.04.03 радиофизика

В настоящее время вариационные расчеты центров и интенсивностей колебательно- вращательных (КВ) спектральных линий малых молекул приобретают все большее значение вследствие их высокой точности, детальности и доступности в широком спектральном диапазоне. В частности, для изотопологов молекулы H_2O канонические спектроскопические базы данных HITRAN и GEISA повсеместно используют как оригинальные вариационные центры и интенсивности для слабых линий поглощения, так и так называемые «эмпирические» списки линий, в которых центры определены из экспериментальных уровней энергии, а интенсивности взяты из вариационного расчета.

Обычная практика создания высокоточного вариационного расчета КВ спектра включает оптимизацию поверхности потенциальной энергии (ППЭ), полученной из первых принципов, исходя из соответствия доступным экспериментальным данным. Этот подход является необходимой составляющей и позволяет существенно повысить точность расчета центров спектральных линий. Однако, указанная процедура может нарушить предсказательные свойства исходной *ab initio* потенциальной поверхности особенно при далекой экстраполяции.

В связи с вышесказанным диссертационная работа Кюберис А.А., в которой реализован метод определения высокоточной *ab initio* ППЭ молекулы на основе учета адиабатической, релятивистской, квантово - электродинамической и неадиабатической поправок к приближению Борна – Оппенгеймера, представляется в высшей степени актуальной. Особенно впечатляет достигнутый прогресс в точности расчета КВ уровней энергии важнейшей для приложений молекулы водяного пара и ее изотопологов. В случае далекой экстраполяции по вращательному квантовому числу J точность расчета КВ уровней с новой ППЭ (0.14 см^{-1}) превосходит точность ППЭ, оптимизированной с использованием экспериментальных данных. Таким образом, использование новой ППЭ позволит продвинуться в решении такой важной проблемы как интерпретация «горячих» спектров водяного пара, связанных с переходами на высоковозбужденные вращательные уровни.

Несомненный интерес представляет также предложенный в работе метод, который позволяет для менее изученных изотопологов $H_2^{17}O$ и $H_2^{18}O$ сконструировать так называемый набор высокоточных «псевдоэкспериментальных» уровней энергии на основе использования большого набора известных экспериментальных уровней энергии молекулы $H_2^{16}O$, а также расчетных вариационных КВ уровней энергии для всех трех изотопологов. Полученные в результате наборы уровней энергии $H_2^{17}O$ и $H_2^{18}O$ могут быть использованы в том числе и для идентификации новых лабораторных спектров.

Метод получения высокоточной ППЭ, разработанный в диссертации, успешно применен также для расчета КВ уровней энергии молекул H_2F^+ и NH_3 в основном электронном состоянии.

Результаты, полученные в диссертации Кюберис А.А., опубликованы в четырех статьях в ведущих международных журналах в области молекулярной спектроскопии и доложены на девяти Российских и международных конференциях, что также подтверждает их значимость и достоверность.

В качестве замечания по тексту автореферата диссертации стоит отметить отсутствие иллюстративного материала, что несколько затрудняет восприятие текста. В автореферате нет упоминания о некоторых работах, приведенных в Списке цитированной

литературы (например, ссылка [B1]). Однако указанные недостатки являются частными и не влияют на общую высокую положительную оценку работы.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертационная работа **Кюберис Александры Александровны** соответствует всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, без сомнения, заслуживает присуждения ей степени кандидата физико – математических наук по специальности 01.04.03 – радиофизика.

Персональные данные О.В. Науменко:

Науменко Ольга Васильевна, с.н.с., к.ф.-м.н., Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук (ИОА СО РАН), 634055, Россия, г. Томск, площадь Академика Зуева, 1. Тел.: 8-9039152128, e_mail: olga@iao.ru

Я выражаю свое согласие на обработку моих персональных данных, связанных с защитой диссертации Кюберис А.А.

Кандидат физ.-мат. наук,
старший научный сотрудник
ИОА СО РАН



О.В. Науменко

16 сентября 2019 года

Подпись О.В. Науменко заверяю:
Ученый секретарь ИОА СО РАН,
кандидат физ.-мат. наук



О.В. Тихомирова