

## ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на диссертационную работу Махнева Владимира Юрьевича «Высокоточные квантовохимические расчеты спектров молекулярной системы HCN/HNC», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук 01.04.03 -- Радиофизика

Система HCN представляет собой важный реагент для создания более сложных азотосодержащих молекул, составляющих блоки аминокислот, таких, как аденин. С другой стороны, вместе с ацетиленом ( $C_2H_2$ ) и метаном ( $CH_4$ ), HCN – одна из базовых молекул для создания большинства более сложных углеродных органических соединений в целом. Исследование синильной кислоты и её изомера также имеет непосредственное приложение на стыке физики и химии. Молекулы HCN/HNC, а точнее говоря, молекулярная система [H,C,N] в целом, является хорошей системой-прототипом для многих сфер химической физики. Помимо этого, система была замечена во множестве различных астрономических объектов, таких как диффузные и полупрозрачные межзвездные облака, плотные межзвездные облака, области формирования звезд, протопланетные диски, околозвездные оболочки вокруг эволюционирующих звезд, сферические ядра галактического центра, внешние галактики, а также в кометах и атмосферах планет. В текущему моменту ясно, что HCN – одна из самых распространенных многоатомных молекул в межзвездном и околозвездном пространстве, и учёт её распространенности необходим в большинстве астрофизических исследований. Всё вышесказанное подчеркивает востребованность и актуальность данной работы.

Практическая значимость работы заключается в применении полученных данных для анализа высокоточных спектров для частот вплоть до ближнего ИК-диапазона. Объектами применимости созданного списка могут быть как лабораторные, так и атмосферные спектры, а также и ряд спектров космических объектов. Результаты работы будут включены в новое издание спектроскопической базы HITRAN2020.

В диссертационной работе Владимиру удалось практически совершить прорыв как в достижении близкой к экспериментальной точности расчета центров молекулы HCN/HNC, так и интенсивности линий поглощения и излучения. До его работы наилучшая достигнутая в литературе точность расчетов центров линий была на порядки хуже. Ему удалось добиться субпроцентной точности расчетов интенсивности линий, что ранее не удавалось, а потребность в этом при моделировании атмосферы Земли (лесные пожары) и атмосфер экзопланет очень велика.

Добиться таких результатов Владимиру удалось за счет отличных знаний, трудолюбия и энтузиазма, настойчивости при достижении поставленных целей. Во время работы им была проявлена инициатива и выдвинуты собственные идеи. Важно, что Владимир часто не соглашался с научным руководителем и отстаивал свою точку зрения в обсуждениях. Я радостью, а часто и с чувством законной гордости наблюдал процесс превращения студента-аспиранта в коллегу и самостоятельного исследователя.

Практически вся литература по теме диссертации опубликована на английском языке и Владимир прочел и творчески освоил материал большого числа зарубежных публикаций. Он выступал докладами на многочисленных конференциях и продемонстрировал хорошее умение доносить результаты исследований до коллег. Владимир уже сейчас работает на уровне пост-доктора (уровне кандидата наук) и у меня нет никаких сомнений, что ему предстоит успешная научная работа в будущем. Его плодотворное взаимодействие с зарубежными коллегами экспериментаторами уже привело к важным научным результатам.

-----

На основании вышеизложенного считаю, что представленная диссертационная работа «Высокоточные квантовохимические расчеты спектров молекулярной системы HCN/HNC» полностью соответствует выбранной специальности 01.04.03 – радиофизика и критериям

становленным Положением о присуждении ученых степеней, а ее автор, В.Ю. Махнев, несомненно, заслуживает присвоения искомой степени кандидата физико-математических наук.

Научный руководитель:  
Ведущий научный сотрудник,  
Кандидат физ-мат наук,  
Почетный профессор Университетского  
Колледжа Лондона

  
(подпись)

Полянский Олег Львович

(расшифровка подписи)

« 29 » апреля 2021 г.

«Подпись Полянского О.Л. заверяю»  
Ученый секретарь ИПФ РАН

  
(подпись)

И.В. Корюкин

(расшифровка подписи)

м.п.

