



29 сентября 2021  
Университетский Колледж Лондона  
Великобритания

Отзыв на автореферат диссертационной работы  
Махнева Владимира Юрьевича  
“Высокоточные квантовохимические расчеты спектров молекулярной системы HCN/HNC”

Диссертация соискателя Махнева Владимира Юрьевича посвящена теоретическим исследованиям спектральных свойств молекулы HCN - синильной кислоты, а также разработке квантово-механических методов, необходимых для их расчета. HCN является одной из ключевых в списке молекул с важными спектральными приложениями, не только научными, но и прикладными. Понимание спектров высокого разрешения, как поглощения, так и испускания, а также умение их предсказывать с высокой точностью, является важным для широкого набора научных и прикладных задач. Одним из важных результатов диссертационной работы Владимира Юрьевича является интерпретация экспериментальных спектров высокого разрешения молекулы HCN, включающая описание колебательно-вращательных (KB) переходов, предсказание положений спектральных линий и KB энергий с высокой точностью, а также, что особенно важно, их интенсивностей. Измерение интенсивностей спектральных переходов молекул с высокой точностью является непростой задачей, доступной только для единичных спектральных измерений в узких диапазонах. Полученный в данной работе список частот и интенсивностей молекулы HCN предлагает широкое покрытие ИК диапазона (выше 1.4  $\mu\text{m}$ ), с высокой точностью положения линий  $\sigma=0.0356 \text{ cm}^{-1}$  (среднеквадратичным отклонением) и очень высокой точностью интенсивностей, порядка 1%. Эти показатели являются уникальным достижением для молекулы HCN. На текущий момент список линий, полученный в диссертационной работе Владимира Юрьевича, является единственным в мире такого уровня качества, причем с большим отрывом. Более того, данный список прошел успешную апробацию на международном уровне и был включен в спектральную базу данных HITRAN, что можно смело рассматривать знаком спектроскопического качества. То же самое можно отнести и к расчетам спектральным свойствам изотопологов молекулы HCN, которые тоже представлены на высоком уровне.

Мне бы также хотелось отметить другой новаторский аспект представленной диссертационной работы. В процессе получения списка линий молекулы HCN были разработаны высококачественные поверхности потенциальной энергии (ППЭ) и дипольного момента (ПДМ) этой молекулы, представленные в виде удобных и физически осмысленных функциональных форм. Если для построения дипольной поверхности достаточно ограничиться аб иницио расчетами, к потенциальным поверхностям предъявляются особые требования, которые могут быть достигнуты только посредством подгонки к экспериментальным данным. Только эмпирически-полученные поверхности позволяют достичь качества, требуемого для современных спектральных приложений. Такие поверхности находят применение в различных приложениях. В том числе я использовал эти самые ППЭ и ПДМ для молекулы HCN, полученные Владимиром Юрьевичем, в своих расчетах. Недавно мы опубликовали методическую статью по линейным молекулам типов XY<sub>2</sub> и XYZ (J. Chem. Phys. 153 (2020) 154106), в которой ППЭ HCN играла важную роль и отлично себя зарекомендовала. Кроме этого, мы использовали данные ППЭ и ПДМ для исследования спектров HCN вне термодинамического равновесия, например в процессе действия электрических разрядов (статья в процессе публикации). Опять же, обе поверхности прошли успешную апробацию в этих работах.

Ну и в заключение я бы отметил особенные свойства нежесткой системы HCN/NHC, с седловой точкой между ППЭ двух изомеров. Эта система непростая для теоретических и расчетных задач, а потому особенно интересная. Детальное понимание изомеризации системы HCN/NHC, представленное в диссертационной работе, является очень важным для будущих молекулярных задач, не только HCN, но и других, схожих систем.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертационная работа Махнева Владимира Юрьевича, соответствует всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ему степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.03 -- радиофизика.



К.ф.м.н.  
Профессор Физики  
Университетского Колледжа Лондона  
Юрченко Сергей Николаевич