

Отзыв на автореферат диссертации Кюберис Александры Александровны “Колебательно-вращательные спектры малых молекул: высокоточные расчеты методами квантовой химии”, представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.03. радиофизика

Диссертационная работа Кюберис А.А. посвящена повышению точности вариационных расчётов колебательно-вращательных уровней малых молекул, находящихся в основных электронных состояниях. Использование в последние годы результатов таких расчётов как для анализа лабораторных спектров, так и для решения прикладных задач атмосферной физики и астрофизики делает эту задачу (повышении точности вариационных расчётов) весьма актуальной.

Автореферат диссертации даёт достаточно ясное представление как об используемых теоретических моделях, так и о полученных результатах. В тексте автореферата достаточно полно описаны как результаты работы в целом, так и личный вклад соискателя. На мой взгляд, автору диссертации удалось внести заметный вклад в решение поставленной задачи: результаты выполненных в работе расчётов используются в настоящее время для анализа спектров ряда молекул (вода, аммиак, радикал H_2F^+). Нет никаких сомнений, что они будут востребованы и при решении прикладных задач.

Результаты работы хорошо апробированы широким представлением на различных спектроскопических конференциях (как в России, так и за рубежом), обсуждением на различных семинарах и публикацией в четырёх статьях в престижных международных журналах.

К сожалению, текст самого автореферата написан достаточно тяжёлым языком, с обилием невнятных, требующих дополнительных разъяснений и даже ошибочных утверждений. Приведём некоторые из них:

1. Трудно согласиться с тем, что “экспериментальная точность измерений по спектрам высокого разрешения ... составляет порядка 10^{-2} см^{-1} ” (стр. 4). Тем более, что автор сопровождает это утверждение ссылкой на работу по анализу спектра молекулы воды в терагерцовом диапазоне. Точность данных цитируемой работы от 10 КГц до 60 МГц.
2. Утверждение “... достижение точности теоретических расчётов частот переходов в 0.1 см^{-1} будет означать, что предсказанная частота окажется в пределах контура экспериментально наблюдаемой линии” на стр. 4 возможно и имеет смысл для атмосферных условий, однако является совершенно неверным для лабораторных спектров, зарегистрированных при низких давлениях (менее 1 торра). В последнем случае на интервале в 0.1 см^{-1} может находиться до десятка и более линий и все они будут спектрально разрешены.
3. Что может означать фраза на стр. 6 “... для достижения реальной точности эксперимента 10^{-2} см^{-1} без использования самих данных эксперимента”?

Стоит обратить внимание на разноречивость в оформлении списка цитируемой литературы. В части ссылок на первом месте стоят фамилии авторов, а затем идёт название работы. В другой части ссылок порядок иной – сначала название работы, а затем список авторов.

Вызывает удивление, что к списку работ по теме диссертации автором отнесены лишь 4 журнальных публикации. Если в библиометрической базе Scopus сделать запрос “Kyuberis A”, то полученный список состоит из 24 статей в рецензируемых журналах, из них как минимум 12 имеют отношение к объектам, рассматриваемым в диссертации (молекулы воды, аммиака и радикал H_2F^+).

Наиболее серьёзное замечание относится к тексту защищаемых положений. В первых четырёх положениях (стр. 7) говорится о колебательно-вращательных, “КВ”, уровнях. Однако из текста автореферата на страницах 12-15 становится понятным, что на самом деле речь идёт исключительно о колебательных ($J=0$) уровнях энергии. Приведённые в защищаемых положениях 1-4 численные значения стандартных отклонений σ относятся именно к колебательным, а не колебательно-вращательным уровням.

Несмотря на сделанные замечания, не затрагивающие, на мой взгляд, сути работы, считаю, что диссертационная работа Кюберис А.А. актуальна по своей тематике, выполнена на высоком научном уровне, содержит новые теоретические и практически значимые результаты. Работа, соответствует требованиям ВАК, а соискатель заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук.

9 сентября, 2019г.

Михайленко Семён Николаевич
кандидат физико-математических наук
Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН
ведущий научный сотрудник
634055, Россия, г. Томск, площадь Академика Зуева, 1
+7 913 118 43 84
semen@iao.ru

Выражаю своё согласие на обработку моих персональных данных, связанных с защитой диссертации.

Подпись С.Н. Михайленко заверяю
учёный секретарь ИОА СО РАН



О.В. Тихомирова