

## 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.

Диссертация Кюберис А.А. посвящена разработке новых методов расчета *ab initio* поверхностей потенциальных энергий (ППЭ) с целью повышения точности вариационных расчетов колебательно-вращательных уровней молекул с небольшим количеством атомов и электронов до точности, достижимой в условиях современного эксперимента. Разработанные методы были применены для расчетов ППЭ ряда изотопологов воды, иона  $\text{H}_2\text{F}^+$  и молекулы аммиака. В результате вариационных расчетов, сделанных с использованием новых ППЭ, были получены колебательно-вращательные уровни энергии с отличием от экспериментальных с точностью порядка  $0.15 \text{ см}^{-1}$  для воды и  $\text{H}_2\text{F}^-$  и порядка  $1 \text{ см}^{-1}$  для молекулы  $\text{NH}_3$ . Замечу, что по моему опыту рутинные ангармонические расчеты дают значения отличные от экспериментальных на десятки  $\text{см}^{-1}$ . На основании полученных ППЭ были впервые рассчитаны достаточно полные и точные списки колебательно-вращательных линий для изотопологов  $\text{H}_2^{17}\text{O}$  и  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ .

Автореферат производит впечатление целостного труда, написан хорошим языком. К замечаниям можно отнести несколько несущественных недостатков.

Первое, слишком категоричное утверждение автора, что поскольку в пакетах квантовохимических программ существует некоторый предельный базовый набор, то "Единственный вариант повышения точности расчета – это применение метода экстраполяции к полному базисному набору" (стр.10). Насколько мне известно, распространённые пакеты программ для квантово-механических расчетов позволяют использовать внешние базисные наборы,

задаваемые пользователем. Так что, по крайней мере, вторым вариантом повышения точности расчета является разработка своих базисных наборов. Естественно, разработка новых базисных наборов является отдельной трудоемкой задачей, и, возможно, словосочетание "единственный вариант" следует читать как "единственный вариант, возможный в данных условиях". Второе замечание касается использования ссылок. К сожалению, ссылки из списка В цитируются в тексте не по порядку, а ссылки из списка А, описывающие доклады автора на конференциях не упоминаются в тексте вообще.

Указанные недостатки, носят не принципиальный характер, не влияют на положения, выносимые на защиту, и общее впечатление от работы. Автореферат диссертации удовлетворяет требованиям, предъявляемым к авторефератам к кандидатским диссертациям, а Кюберис Александра Александровна заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук.

Доцент кафедры Молекулярной  
спектроскопии  
Санкт-Петербургского государственного  
университета  
кандидат физико-математических наук

Асфин Руслан Евгеньевич

spbu.ru  
Россия, 199034, Санкт-Петербург, Университетская  
набережная 7–9  
+7 (812) 428–74–19  
R.Asfin@spbu.ru

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

ЛИЧНУЮ ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ  
НАЧАЛЬНИК ОТДЕЛА КАДРОВ №3  
Н. И. МАШТЕП



Текст документа размещен  
в открытом доступе  
на сайте СПбГУ по адресу  
<http://spbu.ru/science/expert.html>

ДОКУМЕНТ  
ПОДГОТОВЛЕН  
ПО ЛИЧНОЙ  
ИНИЦИАТИВЕ