

**Заключение диссертационного совета МГУ.014.3(МГУ.02.04)
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук**

Решение диссертационного совета от 28.10.2022 г. №134.

О присуждении Терашкевич Вере Андреевне, гражданке России, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Неэмпирический расчет и неадиабатический анализ структурно-динамических параметров астрофизически важных двухатомных частиц: катиона ArH^+ и радикала CN » по специальности 1.4.4. «Физическая химия» принята к защите диссертационным советом 09.09.2022, протокол №115.

Соискатель Терашкевич Вера Андреевна 1993 года рождения, в 2021 году освоила программу подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова

Соискатель работает младшим научным сотрудником на химическом факультете.

Диссертация выполнена на кафедре физической химии химического факультета.

Научный руководитель (консультант) – доктор физико-математических наук, доц. Пазюк Елена Александровна.

Официальные оппоненты:

1. доктор физико-математических наук, Казаков Константин Вячеславович, Институт физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН;
2. доктор физико-математических наук, Сурин Леонид Аркадьевич, Институт спектроскопии РАН;
3. доктор физико-математических наук, Бучаченко Алексей Анатольевич.

дали положительные (отрицательные) отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 14 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации __5__ работ, из них __5__ статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности. Наиболее значимые из них:

1. V.A.Terashkevich, E. A. Pazyuk, A. V. Stolyarov, and D. S. Wiebe. An accurate ab initio electronic structure calculation for interstellar argonium // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2019. V. 234. P. 139–146. - IF : 2.468 WoS
2. V.A.Terashkevich, V. V. Meshkov, E. A. Pazyuk, and A. V. Stolyarov. The collision cross sections for proton–argon interaction based on ab initio ArH^+ potential // *Journal of Plasma Physics*. 2020. V. 86(2). P. 905860202. - IF : 2.014 WoS
3. V.A.Terashkevich, E. A. Pazyuk. Nature of the Fine Structure of Rotational Levels of the Ground $X^2\Sigma^+$ - State of the Radical CN // *Optics and Spectroscopy (English translation of Optika i Spektroskopiya)*. 2021. V. 129(1). P. 12–17. - IF : 0.839 Scopus
4. V.A.Terashkevich, E. A. Pazyuk, A. V. Stolyarov, and D. S. Wiebe. Cosmological constraints on a temporal variation of the proton-to-electron mass ratio based on the red shifted lines of extragalactic argonium // *Astronomy Reports*. 2021. V. 65(12). P. 1211–1214.- IF : 0.980 WoS
5. V.A.Terashkevich, E. A. Pazyuk, and A. V. Stolyarov. A computational study of the non-adiabatic coupling among low-lying doublet states of the CN radical // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2021. V. 276. P. 107916. - IF : 2.468 WoS

На диссертацию и автореферат поступило 0 дополнительных отзывов, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался компетентностью данных ученых в сфере (области) _____, а также имеющимися у них научными публикациями по теме диссертации и способностью определить научную и практическую значимость исследования.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой в рамках адиабатического и неадиабатического приближений, базирующихся на неэмпирических расчетах электронной структуры высокой точности, определены структурно-динамические характеристики астрофизически важных двухатомных частиц (катиона ArH^+ и радикала CN) на экспериментальном уровне точности. .

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. неэмпирические расчеты электронной структуры могут быть использованы для достоверной оценки структурно-динамических параметров изолированных состояний двухатомных молекул, для которых выполнимо адиабатическое приближение;
2. для успешного проведения итерационной процедуры определения структурно-динамических параметров взаимодействующих электронных состояний необходима совокупность высокоточных неэмпирических расчетов электронной структуры и прецизионных экспериментальных спектральных данных;
3. оптимизированный набор межатомных потенциалов и электронных матричных элементов неадиабатического взаимодействия позволяет воспроизвести спектральные данные $X_2\Sigma^+ \sim A_2\Pi \sim B_2\Sigma^+$ комплекса радикала CN в рамках реализованной неадиабатической модели с точностью, сопоставимой с экспериментальной

На заседании 28.10.2022 года диссертационный совет принял решение присудить Терашкевич Вере Андреевне ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек, из них доктора(ов) наук по специальности 1.4.4. «Физическая химия» – 7 человек(а), участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали: «за» – 13, «против» – 0, «недействительных бюллетеней» – 1.

Председатель совета,
д.х.н.

Горюнков А. А.

Ученый секретарь совета,
к.х.н., доц.

Шилина М. И.