

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации

Краснощёкова Сергея Вадимовича

«РЕШЕНИЕ АНГАРМОНИЧЕСКОЙ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ

ДЛЯ МНОГОАТОМНОЙ МОЛЕКУЛЫ НА ОСНОВЕ

ОПЕРАТОРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ВАН ФЛЕКА»,

представленной на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия

Диссертация С. В. Краснощёкова представляет собой описание молекулярного колебательного движения в ангармоническом приближении посредством операторной колебательной теории возмущения Ван Флека. Цель работы заключалась в получение математических выражений для поправок высоких порядков к энергии колебательных уровней и вероятности переходов между ними, найденных в рамках колебательного гамильтониана Ватсона. Одним из основных **результатов работы** является более точный прогноз колебательных спектров веществ, что особенно важно для короткоживущих интермедиатов, в том числе радикалов.

Теоретическое изучение колебательных спектров лежит в основе большого числа спектроскопических и физико-химических моделей. Например, суммирование по энергиям колебательных уровней, взвешенных с фактором Больцмана, даёт колебательный вклад в термодинамические свойства вещества. Представленная работа **актуальна** тем, что направлена на повышение прогностической способности математической модели и расширение границ её применимости (корректная обработка резонансов и правильное воспроизведение высоковозбуждённых состояний). Найденное представление гамильтониана, полученного при канонических преобразованиях и коммутирующего с гамильтонианом гармонического осциллятора, позволяет эффективно использовать в качестве базиса собственные функции модели гармонического осциллятора. При этом основные соотношения получены в аналитическом виде. Это составляет **теоретическую значимость** работы. Следует отметить, что все выражения реализованы в компьютерных кодах, что отражает **практическую значимость** работы.

Некоторые замечания к тексту автореферата и изложенным в нём соображениям.

1. Не нужно сравнивать между собой численные значения величин, полученные в разных моделях, например, как в двух Таблицах 3. Разные модели должны, по определению, давать разные результаты. Сравнения нужно проводить только с экспериментом. Либо сравнивать эффективности моделей по соотношению «цена/качество».

2. В тексте автореферата встречаются непонятные фразы - «критерий колебательных резонансов», например, на страницах 6, 7 и др. Что имеется в виду? Некоторое пороговое значение для «величины резонанса», формула (23) и текст рядом, на основании которого должны быть проведены определенные действия? Или критерий появления (существования) резонанса в системе?
3. Следует различать внутренние координаты, коими являются длины связей, величины валентных и двугранных углов, используемые при описании движений большой амплитуды, и естественные координаты, т.е. приращения длин связей, валентных и двугранных углов (дифференциалы внутренних координат), являющиеся малыми смещениями из положения равновесия.
4. Не очень понятны обозначения амплитуд вероятности (волновых функций) в уравнениях (33), (39), (41) с разным расположением верхних индексов и без. Как они соотносятся с соотношением (26)? Это двойные произведения собственных функций гармонического осциллятора?

В процессе научного поиска автором получены новые и заслуживающие внимания сведения, показана высокая квалификация. Автореферат диссертации Краснощекова С. В. свидетельствует, что рассматриваемая работа удовлетворяет всем требованиям ВАК, в том числе Постановлению правительства РФ «О порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к докторским диссертациям по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук.

Заведующий кафедрой физики, математики и медицинской информатики
Тверского государственного медицинского университета
доктор физико-математических наук, доцент


Туровцев Владимир Владимирович

e-mail: turtsma@tversu.ru

170100, г. Тверь, ул. Советская, 4, ФБГОУ ВО «Тверской государственный медицинский университет», раб. тел. (4822) 32 11 70.

Подпись 
удостоверяю
Зам. нач. управления кадров 
И.Б. Балашова

10.04.17