

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Краснощекова Сергея Вадимовича
«РЕШЕНИЕ АНГАРМОНИЧЕСКОЙ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ
МНОГОАТОМНОЙ МОЛЕКУЛЫ НА ОСНОВЕ ОПЕРАТОРНОЙ ТЕОРИИ
ВОЗМУЩЕНИЙ ВАН ФЛЕКА»,

представленной на соискание учёной степени доктора физико-математических наук
по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия

Необходимый шаг для интерпретации экспериментальных молекулярных колебательных спектров — расчёт *ab initio* многомерной поверхности потенциальной энергии (ППЭ) многоатомной молекулы. Однако владение техникой такого расчёта само по себе ещё недостаточно для определения молекулярных спектроскопических параметров, таких как наблюдаемые частоты и ангармонические постоянные. Будучи основана на знании ППЭ, необходима дальнейшая весьма трудоёмкая работа, как аналитическая, так и вычислительная. Решению возникающих на этом пути проблем и посвящена данная диссертация.

На наш взгляд, **важнейший результат работы как раз и состоит в уверенной интерпретации экспериментальных результатов для длинного ряда молекул, что составляет предмет последней 7-й главы.** Чтобы достичь этого результата, автор предложил новые решения ряда весьма сложных задач, из которых следует особо выделить следующие достижения, безусловно, докторского уровня:

- ▶ разработана и реализована методология решения многомерного колебательного уравнения Шредингера для полужестких молекул во втором, четвертом и более высоких порядках, использующая аналитические операторные преобразования;
- ▶ развита теория колебательных полиад многоатомных полужестких молекул и разработан новый метод расчета формулы полиадного квантового числа.

Уровень и оригинальность полученных результатов подтверждаются публикациями в ведущих отечественных и зарубежных журналах (количество статей — 25), в частности, в таких авторитетных, как “*The Journal of Chemical Physics*” и “*The Journal of Physical Chemistry A*”. Основные результаты доложены на ряде международных конференций.

Считаем, что по своему уровню и числу полученных оригинальных результатов диссертация С. В. Краснощекова соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к докторским диссертациям по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия, и её автор заслуживает присуждения учёной степени доктора физико-математических наук.

Ведущий научный сотрудник
доктор физико-математических наук
(01.04.05 – оптика)



Лаптев Владимир Борисович

ФГБУН Институт спектроскопии Российской академии наук (ИСАН)

Адрес: 142190, г. Москва, г. Троицк, ул. Физическая, д. 5

Тел.: +7(495)8510231

E-mail: laptev@isan.troitsk.ru

24 апреля 2017 г.

Главный научный сотрудник
доктор физико-математических наук
(01.04.05 – оптика)



Макаров Александр Аркадьевич


ФГБУН Институт спектроскопии Российской академии наук (ИСАН)

Адрес: 142190, г. Москва, г. Троицк, ул. Физическая, д. 5

Тел.: +7(495)8510872

E-mail: amakarov@isan.troitsk.ru

24 апреля 2017 г.

Подписи В.Б. Лаптева и
А.А. Макарова заверены
ученым секретарем ИСАН
 В.Б. Теркина

