

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Краснощёкова Сергея Вадимовича**  
**"РЕШЕНИЕ АНГАРМОНИЧЕСКОЙ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ  
ДЛЯ МНОГОАТОМНОЙ МОЛЕКУЛЫ НА ОСНОВЕ  
ОПЕРАТОРНОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ВАН ФЛЕКА"**.

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

Как следует из содержания автореферата диссертации, проведённые соискателем исследования направлены на совершенствование теории и неэмпирических методов расчёта, используемых в моделировании низковозбуждённых ангармонических колебательных состояний и вероятностей переходов в изолированных полужестких молекулах. Исследования основаны на операторной теории возмущений Ван Флека во втором и более высоких порядках с использованием колебательного гамильтониана Ватсона. Направленность исследований, их цели и задачи определяют **актуальность** темы диссертации с точки зрения фундаментальной науки и многочисленных приложений, о которых подробно говорится в диссертации.

В плане усовершенствования теории Ван Флека следует отметить аналитическое приведение исходного гамильтониана к квазидиагональному виду и создание на этой основе алгоритмов и программного обеспечения для решения ангармонической колебательной задачи и расчётов вероятностей переходов в колебательных спектрах молекул, содержащих до восьми атомов. Внесено новое в методику расчёта резонансных эффектов. Указано на целесообразность учёта высших порядков теории возмущений (четвёртого) в моделировании колебательных спектров некоторых молекул в ангармоническом приближении. Это – часть результатов, перечисленных в автореферате, определяющих **новизну** исследований.

Продемонстрированный автором подход к решению ангармонической колебательной задачи, использующий модели и язык современной квантовой теории, заслуживает высокой оценки.

Полученные в ходе исследований результаты **достоверны**, они прошли достаточную **апробацию**. Разработанная автором методика и созданный им программный продукт использованы в моделировании структуры и спектров ряда молекул. Результаты моделирования опубликованы в статьях, список которых содержится в автореферате. В автореферате, чётко обозначен **личный вклад** соискателя.

Некоторые замечания, индуцированные текстом автореферата.

Относительно сравнения полуэмпирических колебательных частот (масштабированных) с рассчитанными не эмпирически в ангармоническом



приближении, показавшего "высокую степень их соответствия", замечу, что этот пункт можно было опустить из раздела "новизна". Заслуживает внимание и в гораздо большей степени впечатляет сравнение измеренных и рассчитанных ангармонических частот. Этими результатами можно гордиться. Относительно подгоночных параметров замечу, что они конечно же полезны, когда учёт ангармонизма по разным причинам не представляется возможным, а интерпретировать спектры больших молекул (с числом атомов гораздо больше восьми) или гомологических рядов необходимо. Ангармонизм в таких параметрах исследователи учитывают "эффективно", масштабируя силовые постоянные, частоты (в СССР был свой простой метод учёта ангармонизма: он осуществлялся ведением в расчёт эффективной массы водорода, и получался приемлемый результат).

Замечание по оформлению: автореферат выполнен в чёрно-белом варианте, поэтому ссылки на цвета спектральных кривых не облегчают восприятие текста. К счастью я располагал pdf-файлом, который помогал устанавливать взаимно-однозначное соответствие.

Знакомство с содержанием автореферата диссертации дает основание заключить, что в представленной работе поставлена и решена крупная задача теоретического плана, относящаяся к квантовой химии, которая в настоящее время стала междисциплинарной наукой, и тесно связанной с ней теоретической колебательной спектроскопией. Результаты, представленные в диссертации найдут широкое практическое применение в исследовании структуры многоатомных молекул, их колебательных спектров и свойств. Автор диссертации и автореферата предстаёт как специалист высокого уровня, обладающий математической культурой и глубоко владеющий предметом исследования.

Работа отвечает требованиям, предъявляемым ВАК к докторским диссертациям. Её автор, Краснощёков Сергей Вадимович, заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия.

Зав. кафедрой теоретической физики  
ФГБОУ ВО "Саратовский национальный исследовательский  
государственный университет имени Н.Г. Чернышевского"  
доктор физико-математических наук  
профессор

 БАБКОВ Лев Михайлович

410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83  
Тел. (845 2) 511757  
e-mail: [babkov@sgu.ru](mailto:babkov@sgu.ru)

