

**ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук Чан Сюаньхао
на тему: «Систематические неэмпирические прямые методы описания
колебательно-вращательных состояний полужестких молекул на основе
методов возмущений»
по специальности 1.4.4 – «Физическая химия»**

Исследование инфракрасного высокого разрешения спектра легких молекул имеет огромное значения для многих областей науки, в первую очередь, при изучении атмосферы Земли и в астрофизике.

Традиционный метод исследования колебательно-вращательных спектров молекул связан с использованием эффективных гамильтонианов центробежного искажения при помощи теории возмущений. Они применяются как для описания экспериментальных данных по изолированному колебательному состоянию, так и по группе взаимодействующих состояний. Данный подход привел к большим успехам в теоретическом анализе спектров огромного числа молекул. В настоящее время он является основным при изучении инфракрасного спектра высокого разрешения многоатомных молекул.

Однако традиционный подход сталкивается с трудностями при описании высоковозбужденных колебательно-вращательных состояний молекулы. С возрастанием энергии увеличивается количество колебательных состояний, принадлежащих резонансным полиадам. Некоторые состояния, которые не наблюдаются в спектре, могут возмущать наблюдаемые полосы, играя роль так называемых «темных» состояний. Их приходится учитывать при определении спектроскопических постоянных исследуемых уровней, т.е. при описании спектра нужна информация о всех взаимодействующих колебательных состояниях. При этом возникает необходимость либо использовать альтернативный метод, например, вариационный, который глобально описывает спектроскопическую информацию вплоть до энергии диссоциации молекул, либо развивать метод

возмущений более высокого порядка малости, который позволяет расширить применимость полученной эффективной модели и предсказывать наличие взаимодействий колебательных состояниях в высоковозбужденной части спектра.

Диссертационная работа Чан Сюаньхао посвящена разработке методов теории возмущений для описания колебательно-вращательных состояний и спектров полужестких молекул. В работе разрабатывается теория эффективного гамильтониана и колебательный метод ресуммирования. В рамках диссертационной работы рассматриваются спектры молекул диоксида серы и ацетилена в качестве примера применения теории.

Обе молекулы представляют как практический, так и теоретический интерес к изучению по причине образования в огромных количествах в виде отходов. Молекула диоксида серы является одним из ведущих газов, загрязняющих земную атмосферу. Со стороны планетологии его содержание в атмосфере Венеры превосходит в миллион раз земное. Ацетилен присутствует лишь в следовых количествах в земной атмосфере, но он обнаружен в межзвездных газовых облаках и в большом количестве присутствует на Титане. Инфракрасный спектр обеих молекул достаточно интенсивно исследуются за последние 30 лет при помощи различных экспериментальных и теоретических подходов, и они представляют собой подходящие пробные камни для проведения тестового расчёта. Эти соображения определяют **актуальность** научного исследования, представленного в диссертационной работе Чан Сюаньхао.

Диссертация Чан Сюаньхао состоит из введения, четырех глав и списка литературы и представляет собой логически замкнутую работу, содержание которой полностью отражено в Оглавлении.

В первых двух главах изложены основные теоретические положения, на которых основывается реализация теории эффективных гамильтонианов полужестких молекул и колебательного метода ресуммирования. Результаты оригинальных исследований представлены в

двух последующих главах. Третья глава посвящена решению прямой колебательно-вращательной задачи полужёсткой молекулы диоксида серы на основе операторной теории возмущений. В четвертой главе рассматривается применение колебательного метода ресуммирования к исследованию резонансной структуры линейной молекулы ацетилена.

К наиболее важным определяющим научную новизну и практическую значимость работы, результатам относятся:

- Разработаны аналитические математические формулы нормального упорядочения вращательных операторов и D-функций Вигнера и схема вычисления редуцированных вращательных параметров в нормально-упорядоченном представлении. В качестве примера для диоксида серы впервые получены *ab initio* вращательные центробежные постоянные до восьмого порядка включительно. Систематически промоделирован колебательно-вращательный спектр молекулы диоксида серы при помощи предлагаемого подхода.
- Применена аналитическая формула теории возмущений Релея Шредингера (ТВРШ) высокого порядка в вырожденном случае для описания колебательных состояний линейных молекул. Показано, что расходящийся ряд ТВРШ и его суммирование с помощью кватерниона аппроксиманта Паде-Эрмита дает качественную структуру резонанса линейных молекул; продемонстрирован теоретический аргумент существования межполиадных резонансов, установленных ранее в экспериментальных работах.

Научные положения и выводы диссертационной работы сформулированы корректно и с должной степенью общности, обоснованы представленными в работе результатами. Текст диссертации и автореферат полностью отражают содержание выполненной работы. Достоверность результатов работы, надежность и обоснованность итоговых выводов и рекомендаций не вызывает сомнений. Результаты проведенных исследований представлены в 7 научных статьях, опубликованных в рецензируемых

научных журналах, индексируемых в базах данных WebofScience, Scopus, RSCI, и полностью соответствующих научной области диссертации. Материалы работы прошли апробацию и обсуждались на международной научной конференции.

Основным замечанием к работе является наличие орфографических ошибок, например несогласованность окончаний слов. Впрочем, эти ошибки легко объяснимы. Можно было более полно привести сравнение полученных в диссертации результатов с экспериментальными данными.

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским Государственным Университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует специальности 1.4.4.– «Физическая химия» (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова, а также оформлена согласно требованиям Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Таким образом, соискатель Чан Сюаньхао заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 –«физическая химия».

Официальный оппонент:

кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, отдел микроволновой спектроскопии, Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук

Зобов Николай Федорович

«8» июня 2023 г.

Контактные данные:

тел.: _____, e-mail: _____

Специальность, по которой официальным оппонентом
защищена диссертация:

01.04.03– Радиофизика

Адрес места работы:

603950, г. Нижний Новгород, ул. Ульянова, 46

Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова РАН

отдел микроволновой спектроскопии

Тел.: +7 (831) 416-49-32; e-mail: dir@ipfran.ru

Подпись сотрудника ИПФ РАН

Н.Ф. Зобова удостоверяю:

Ученый секретарь ИПФ РАН



8 июня 2023 г.