

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

Решение диссертационного совета от «16» июня 2023 г. № 149

О присуждении Чану Сюаньхао, гражданину Китайской Народной Республики, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Систематические неэмпирические прямые методы описания колебательно-вращательных состояний полужестких молекул на основе методов возмущений» по специальности 1.4.4. – «Физическая химия» принята к защите диссертационным советом 21 апреля 2023 года, протокол № 146.

Соискатель Чан Сюаньхао, 1994 года рождения, обучается в очной аспирантуре химического факультета на кафедре физической химии по специальности 02.00.17 по направлению «Математическая и квантовая химия» с 01.10.2019 г. по настоящее время.

В настоящее время соискатель не работает.

Диссертация выполнена на кафедре физической химии химического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, Краснощеков Сергей Вадимович, ведущий научный сотрудник кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова.

Официальные оппоненты:

- Перевалов Валерий Иннокентьевич, доктор физико-математических наук, ФГБУН Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук, отделение спектроскопии атмосферы, лаборатория теоретической спектроскопии, главный научный сотрудник,
- Соломоник Виктор Геннадьевич, доктор химических наук, профессор, Ивановский Государственный Химико-Технологический Университет, факультет неорганической химии и технологии, кафедра физики, ведущий научный сотрудник
- Зобов Николай Федорович, Кандидат физико-математических наук, Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук, отделение нелинейной динамики и оптики, отдел микроволновой спектроскопии, старший научный сотрудник

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 7 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 7 работ, из них 7 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.4. – «Физическая химия»:

1) **Chang X.**, Efremov I. M., Millionshchikov D. V., Krasnoshchekov S. V. Normal Ordering of the Angular Momentum Cylindrical Ladder Operators and their Products with Wigner D-functions // The

Journal of Chemical Physics. – 2023. – Vol. 158. – P. 104802. **(Импакт-фактор JIF: WoS 4.304)**

2) **Chang X.**, Dobrolyubov E. O., Krasnoshchekov S. V. Vibrational resonance analysis of linear molecules using resummation of divergent rayleigh–schrodinger perturbation theory series // Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. – 2023. – Vol. 288. – P. 122071. **(Импакт-фактор JIF: WoS 4.831)**

3) **Chang X.**, Dobrolyubov E. O., Krasnoshchekov S. V. Fundamental studies of vibrational resonance phenomena by multivalued resummation of divergent rayleigh-schrodinger perturbation theory series: deciphering polyad structures of three H₂¹⁶O isotopologues // Physical Chemistry Chemical Physics. – 2022. – Vol. 24, № 11. – P. 6655–6675. **(Импакт-фактор JIF: WoS 3.945)**

4) Krasnoshchekov S. V., Egor O. D., **Chang X.** Hypoflorous acid (hof): A molecule with a rare (1, -2, -1) vibrational resonance and (8,3,2) polyad structure revealed by padé-hermite resummation of divergent rayleigh-schrodinger perturbation theory series // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2021. – Vol. 268. – P. 107620. **(Импакт-фактор JIF: WoS 2.342)**

5) **Chang X.**, Krasnoshchekov S. V., Pupyshev V. I., Millionshchikov D. V. Normal ordering of the su(1, 1) ladder operators for the quasi-number states of the morse oscillator // Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics. – 2020. – Vol. 384, № 19. – P. 126493–1–126493–8. **(Импакт-фактор JIF: WoS 2.707)**

6) Краснощеков С. В., Добролюбов Е. О., **Чан С.** Фундаментальный анализ сингулярных и резонансных явлений в колебательных полиадах молекулы дифторсилилена // Оптика и спектроскопия. – 2020. – Т. 128, № 12. – С. 1795–1805. **(Импакт-фактор РИНЦ: 0.853)**

7) Krasnoshchekov S. V., **Chang X.** Ladder operators for morse oscillator and a perturbed vibrational problem // International Reviews in Physical Chemistry. – 2019. – Vol. 38, № 1. – P. 63–113. **(JIF: WoS 7.478)**

На диссертацию и автореферат поступило 3 дополнительных отзыва, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области физической и квантовой химии, молекулярной спектроскопии, а также большим количеством научных публикаций в соответствующих областях исследований.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является научно квалификационной работой, в которой автором методами теоретической и вычислительной спектроскопии впервые рассчитаны А-редуцированные параметры эффективного гамильтониана для молекулы диоксида серы, и оценены частоты колебательно-вращательных переходов для трех фундаментальных колебаний; предложен эффективный математический метод моделирования резонансных эффектов для молекул, содержащих вырожденные колебательные моды.

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. Предложенный теоретический аппарат нормального упорядочения лестничных операторов углового момента и его использование в рамках численно-аналитической операторной теории возмущений представляет эффективную систематическую вычислительную стратегию для

моделирования колебательно-вращательных спектров и предсказания параметров эффективного гамильтониана для молекул типа асимметричного волчка.

2. Определение вероятностей переходов между колебательно-вращательными состояниями может быть эффективно реализовано с использованием нормально-упорядоченных произведений лестничных операторов углового момента и функций Вигнера. Высокая эффективность разработанного подхода доказана расчётом параметров эффективного гамильтониана в A-редукции на примере молекулы оксида серы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$.

3. Реализация теории возмущений Релея-Шредингера в вырожденном случае с анализом сингулярности расходящихся рядов подтверждает экспериментально установленную резонансную структуру колебательных состояний молекулы ацетилена, включая межполиадные резонансы, обнаруженные в высоковозбужденной части спектра.

На заседании 16 июня 2023 года диссертационный совет принял решение присудить Чану Сюаньхао ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 6 докторов наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия» (физико-математические науки), участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 15, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель диссертационного совета
д.х.н., доцент

Горюнков А.А.

Ученый секретарь диссертационного совета
к.х.н., доцент

Шилина М.И.

16.06.23