

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Чан Сюаньхао «Систематические неэмпирические прямые методы описания колебательно-вращательных состояний полужестких молекул на основе методов возмущений», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Диссертационная работа Чан Сюаньхао посвящена развитию методов теории возмущений для описания колебательно-вращательных состояний и спектров полужестких молекул. В работе проведено обширное многостороннее исследование, относящееся к проблемам построения моделей, позволяющих описывать спектры многоатомных молекул. Задействованы ключевые теоретические методы современной спектроскопии и квантовой химии. Ценным ядром работы является идея связывания неэмпирических квантово-химических расчетов (в работе автор использует *ab initio*) с моделями эффективных гамильтонианов и дипольных моментов, широко используемых в практике спектроскопического анализа. Автором работы предложен системный подход к построению модели эффективного гамильтониана для молекул типа асимметричного волчка. Реализована схема контактных преобразований, представляющая собой вариант операторной теории возмущений в колебательно-вращательной теории. Приведен метод анализа расходимости, получаемых рядов эффективных гамильтонианов с последующим ресуммированием этих рядов. Предложен метод оценки межполиадных колебательных резонансов, которые с неизбежностью возникают при анализе высоковозбужденных состояний. Проведенные в работе расчеты на всех этапах критически сравнены с имеющимися данными в литературе и спектроскопических базах.

В качестве замечаний к автореферату следует отметить следующее:

1. В диссертационной работе рассматривается модель эффективных операторов, для которой предлагается осуществлять прямой расчет параметров на основании потенциального поля, являющегося степенным рядом нормальных координат. Однако не озвучено, имеется ли возможность корректировки потенциального поля, решая обратную задачу, основываясь на предложенной автором реализации теории возмущений, а также, возможно ли применить предложенный метод, используя аналогичную аналитику и методы ресуммирования к молекулам, имеющим колебания большой амплитуды.

2. Автореферат и диссертационная работа написаны со «значительным грамматическим акцентом» в русском языке.

Указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Работа является отражением высокой квалификации автора, который демонстрирует полную погруженность в тему, владение современными методами вычислительной квантовой химии, глубокими знаниями физических основ, используемых методов и моделей.

Рассмотрение диссертации по приведенной в автореферате ссылке позволяет заключить, что по своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов диссертация соответствует критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», а её автор, Чан Сюаньхао, заслуживает присуждения ученой степени кандидата наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

#### Автор отзыва

ФИО: Бехтерева Елена Сергеевна

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: профессор

Почтовый адрес: 634050, г. Томск, пр-кт Ленина, 30, ТПУ, ИШФВП,

Контактная информация:

Тел.: +7 (383) 225-0000

Адрес электронной почты: \_\_\_\_\_

Место работы: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Название подразделения: Исследовательская школа физики высокоэнергетических процессов

Должность: Профессор

Подпись: \_\_\_\_\_

Подпись сотрудника Бехтеревой Е. С. удостоверяю:  
Кулинич Е. А., к.т.н., Ученый секретарь ТПУ

«14» июня 2023 г.

