

## ОТЗЫВ

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

Исследование влияния внутримолекулярных взаимодействий на фундаментальные физические характеристики молекул как дипольный момент, поляризуемость молекул, потенциальная поверхность на параметры спектральных линий представляет научный и практический интерес. Для надежной интерпретации спектров высокого и сверхвысокого разрешения, наблюдаемых на современных спектральных приборах, и предсказания новых необходимы методы расчёта параметров спектральных линий повышенной точности и учет различных тонких внутримолекулярных взаимодействий, что определяет актуальность диссертационного исследования.

При формулировке теории эффективных гамильтонианов, которая является одной из основных методов описания колебательно-вращательных состояний молекул, необходимо учитывать многие внутримолекулярные взаимодействия, что не является тривиальной задачей. Поэтому автору было необходимо не только развивать саму теорию, но и создать пакет прикладных программ, решающих данную проблему. При помощи разработанного пакета программ проведенное изучение внутримолекулярной динамики молекул, а также моделирование спектральных характеристик молекул соответствует паспорту (п.1) специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Объектами исследования диссертации являются полужесткие молекулы диоксида серы  $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$  и ацетилена  $^{12}\text{C}_2\text{H}_2$ , которые относятся к классу астрохимических молекул и исследуются в качестве тестовых примеров разработанных теоретических методов. Достоверность полученных результатов путем расчётов подтверждается согласием теоретических значений полученных спектроскопических параметров с экспериментально установленными значениями. Результаты представленной работы могут быть использованы в областях экспериментальной, вычислительной и теоретической молекулярной спектроскопии.

Из новых полученных результатов можно выделить

- Систематическое моделирование колебательно-вращательного спектра молекулы диоксида серы;
- Аналитический подход нормального упорядочения вращательных операторов и функций Вигнера, позволившие более эффективно реализовать метод контактных преобразований.

Основные результаты диссертации опубликованы в международных научных журналах по физической химии и молекулярной спектроскопии, в том числе 7 статьях в рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI и рекомендованных к защите в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Считаю, 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 физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

ФИО: Черепанов Виктор Николаевич

Ученая степень: доктор физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Ученое звание: доцент

Почтовой адрес: 634050, Томск, пл.Новособорная,1 (СФТИ), офис 226

Контактная информация:

Тел.: +7 (3822) 529-640 ; сот. 8-922-100-07-02.

Адрес электронной почты: [cherpanov@tmsu.ru](mailto:cherpanov@tmsu.ru)

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

Название подразделения: Физический факультет, кафедра оптики и спектроскопии.

Должность: заведующий кафедрой.

«10» июня 2023 г.

М.Л

В.Н. Черепанов

Л.Н

УДОСТОВЕРЯЮ  
ДОКУМЕНТОВЕД  
ДРГИЕНКО И.В.

