

## 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.

Разработка *ab initio* методов, построение эффективных алгоритмов, создание программ расчёта энергетических уровней и волновых функций молекул, вероятностей дипольных переходов является задачей, решение которой открывает новые перспективы для различных направлений в науке. В частности изучение колебательно – вращательных спектров молекул имеет как фундаментальное, так и прикладное значение для исследования атмосферы Земли и планет Солнечной системы, экзопланет и межзвездной среды. Поэтому цели и задачи диссертации Чан Сюаньхао, её результаты и выводы являются актуальными и имеют очевидное теоретическое значение и практическую ценность.

Среди результатов, полученных лично автором, необходимо отметить анализ аналитических свойств колебательной энергии молекул. Фактически автор продемонстрировал, на примере молекулы ацетилена, что анализа квадратичных точек ветвления – точек Каца, объясняет сильные возмущения колебательных состояний и предсказывает новые, в том числе и межпериодные резонансы. До настоящего времени анализ случайных резонансов проводился только на основе экспериментальных данных. Поэтому изучение аналитических свойств колебательных состояний, проводимый с помощью *ab initio* поверхности потенциальной энергии, позволяет предсказать особенности в применении подхода эффективных операторов до измерений.

Существенное значение для решения практических задач молекулярной спектроскопии имеют представленные в третьей главе расчёты вращательных и центробежных постоянных эффективного вращательного гамильтониана. Неэмпирические вычисления этих параметров находятся в прекрасном согласии с постоянными, восстановленными из экспериментальных спектров. Такие, полученные из *ab initio* вычислений значения, становятся надёжным ориентиром при решении обратной задачи по восстановлению параметров эффективного гамильтониана из спектров. В настоящее время набор параметров, необходимый для достижения согласия с экспериментом, определяется методом проб и ошибок. Очевидно и направление дальнейшего продолжения работы – вычисления параметров так называемых резонансных блоков

эффективного гамильтониана, описывающих резонансные возмущения колебательно – вращательных состояний молекул.

В целом диссертация Чан Сюаньхао представляет значительное продвижение в развитии расчетных методах квантовой химии в части, относящейся к колебательно – вращательным степеням свободы. По актуальности решаемой проблемы, новизне результатов и выводов, их объему и практической значимости, диссертация соответствует критериям, определенным положениям о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а автор достоин присуждения ученой степени кандидата наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Быков Александр Дмитриевич,  
д.ф.-м.н. профессор,  
634055, Томск, площадь академика Зуева, 1

Институт оптики атмосферы им. В.Е.Зуева СО РАН,  
г.н.с., лаборатория молекулярной спектроскопии  
02 июня 2023 года

Подпись А.Д.Быкова заверяю  
Ученый секретарь ИОА СО РАН  
к.ф.-м.н.

  
О.В. Тихомирова

