

Сведения о научном руководителе

диссертации Чан Сюаньхао

«Систематические неэмпирические прямые методы описания колебательно-вращательных состояний полужестких молекул на основе методов возмущений»

Научный руководитель: Сергей Вадимович Краснощеков

Учёная степень: доктор физико-математических наук

Ученое звание: отсутствует

Должность: ведущий научный сотрудник

Место работы: Химический факультете МГУ им. М.В. Ломоносова, кафедра физической химии

Адрес места работы: Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3

Тел.: +7(495)939-24-13

E-mail: sergeyk@phys.chem.msu.ru

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4 – физическая химия за последние 5 лет:

- 1) Normal ordering of the angular momentum cylindrical ladder operators and their products with Wigner D-functions / C. Xuanhao, D. V. Millionshchikov, I. M. Efremov, S. V. Krasnoshchekov // *Journal of Chemical Physics*. — 2023. — Vol. 158, — P. 104802.
- 2) Photosensitivity of nanostructured schottky barriers based on gap for solar energy applications / V. Rud, D. Melebaev, V. Krasnoshchekov et al. // *Energies*. — 2023. — Vol. 16, no. 5. — P. 1–15.
- 3) Xuanhao C., Dobrolyubov E. O., Krasnoshchekov S. V. Fundamental studies of vibrational resonance phenomena by multivalued resummation of divergent Rayleigh-Schrödinger perturbation theory series: deciphering polyad structures of three H₂¹⁶O isotopologues // *Physical Chemistry Chemical Physics*. — 2022. —

Vol. 24, no. 11. — P. 6655–6675.

- 4) Non-empirical analysis of isotopic shifts and resonance effects in the infrared high-resolution spectrum of freon-22 (CHF_2Cl), enriched with ^{13}C / S. V. Krasnoshchekov, I. K. Gainullin, V. B. Laptev, S. A. Klimin // *Optics and Spectroscopy* (English translation of *Optika i Spektroskopiya*). — 2022. — Vol. 132, no. 1. — P. 8–18.
- 5) Xuanhao C., Dobrolyubov E. O., Krasnoshchekov S. V. Vibrational resonance analysis of linear molecules using resummation of divergent Rayleigh–Schrödinger perturbation theory series // *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. — 2022. — P. 122071.
- 6) Неэмпирический анализ изотопических сдвигов и резонансных эффектов в инфракрасном спектре высокого разрешения фреона-22 (CHF_2Cl), обогащенного ^{13}C / С. В. Краснощекков, И. К. Гайнуллин, В. Б. Лаптев, С. А. Климин // *Оптика и спектроскопия*. — 2022. — Т. 130, № 1. — С. 11–22.
- 7) *Krasnoshchekov S. V., Egor O. D., Xuanhao C.* 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-schrödinger perturbation theory series // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 2021. — Vol. 268. — P. 107620.
- 8) *Krasnoshchekov S. V., Laptev V. B., Gainullin I. K.* Infrared vibrational spectra and absolute intensities of fundamental bands of bis(trifluoromethyl)ketene: ab initio interpretation using the second order operator Van Vleck perturbation theory // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 2021. — P. 107952.
- 9) *Krasnoshchekov S. V., E O. D., Xuanhao C.* Fundamental analysis of singular and resonance phenomena in vibrational polyads of the difluorosilylene molecule // *Optics and Spectroscopy* (English

- translation of Optika i Spektroskopiya*). — 2020. — Vol. 128, no. 12. — P. 1927–1938.
- 10) Normal ordering of the $su(1, 1)$ ladder operators for the quasi-number states of the morse oscillator / C. Xuanhao, S. V. Krasnoshchekov, V. I. Pupyshev, D. V. Millionshchikov // *Physics Letters, Section A: General, Atomic and Solid State Physics*. — 2020. — Vol. 384, no. 19. — P. 126493–1–126493–8.
 - 11) Overtone spectroscopy of $\nu(C=O)$ stretching vibration of hexafluoroacetone: Experimental and ab initio determination of peak positions, absolute intensities, and band shapes / S. V. Krasnoshchekov, V. B. Laptev, S. A. Klimin et al. // *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. — 2020. — Vol. 238. — P. 118396–1–118396–9.
 - 12) Rigorous vibrational Fermi resonance criterion revealed: two different approaches yield the same result / S. V. Krasnoshchekov, E. O. Dobrolyubov, M. A. Syzgantseva, R. V. Palvelev // *Molecular Physics*. — 2020. — Vol. 118, no. 11. — P. e1743887.
 - 13) Structural and transport features of sp-carbon films synthesized by pulsed plasma deposition on various metal substrates / I. P. Ivanenko, S. V. Krasnoshekov, A. V. Pavlikov et al. // *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*. — 2020. — Vol. 14, no. 6. — P. 1239–1246.
 - 14) Структурные и транспортные особенности SP-углеродных пленок, синтезированных импульсно-плазменным методом на различных металлических подложках / И. П. Иваненко, С. В. Краснощеков, А. В. Павликов и др. // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. — 2020. — № 12. — С. 12–20.
 - 15) Disentangling the IR spectra of 2,3,3,3-tetrafluoropropene using an ab initio description of vibrational polyads by means of canonical Van

Vleck perturbation theory / A. P. Charmet, L. Bizzocchi, B. M. Giuliano et al. // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. — 2019. — Vol. 239. — P. 106656–1–106656–22.

Учёный секретарь диссертационного совета МГУ.014.3

Кандидат химических наук, доцент



М.И. Шилина