

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации КРАСНОЩЕКОВА Сергея Вадимовича
**«Решение ангармонической колебательной задачи для многоатомной
молекулы на основе операторной теории возмущений Ван Флека»**,
представленной на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук
по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия.

Детальное знание структуры колебательного спектра молекул необходимо для решения ряда задач науки и практики. В этом отношении развитие теории для описания ангармонических колебаний и разработка прецизионных методов расчета колебательных спектров из первых принципов, несомненно, представляет собой актуальную задачу.

В диссертационной работе Краснощекова С.В. на основе теории возмущений в форме контактных преобразований (каноническая теория возмущений Ван Флека) разработана методология решения многомерного колебательного уравнения Шредингера для изолированных полужестких молекул во втором, четвертом и более высоких порядках.

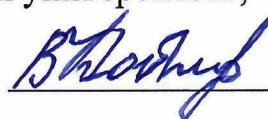
На этой теоретической основе создан комплекс алгоритмов и разработано программное обеспечение, ориентированное на решение ангармонической колебательной задачи для свободной полужесткой молекулы с расчетом вероятностей переходов в спектрах поглощения и комбинационного рассеяния. Отметим, что если методы оценки интенсивностей ангармонических переходов в ИК-спектрах разрабатывались достаточно активно, то расчеты интенсивностей в спектрах КР до исследований Краснощекова С.В. представляли собой мало исследованную область. Применение теории возмущений в форме КП вместе с теорией комбинационного рассеяния позволили выйти на качественно новый уровень расчетов интенсивностей КР как для фундаментальных колебаний, так и для обертонов и составных частот.

Моделирование ангармонических колебаний с использованием разработанных подходов позволило получить ряд новых теоретических результатов и показало важность учета четвертого порядка теории возмущений. Интерпретированы колебательные спектры практически важных молекул, в том числе обладающих биологической активностью.

Диссертационная работа Краснощекова С.В. представляет собой целостное исследование, посвященное решению актуальной теоретической проблемы описания ангармонического колебательного движения ядер в молекулах и

созданию эффективных алгоритмов расчетов энергий и интенсивностей соответствующих колебательных переходов. Содержание работы соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор заслуживает присуждения ему искомой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия.

Профессор кафедры физической и коллоидной химии
ФГБОУ ВО «Иркутский государственный университет»,
доктор химических наук, профессор
Кобычев Владимир Борисович



В.Б. Кобычев

Тел. +7(3952)521211

e-mail: gimli@cc.isu.ru



Зав. лабораторией квантовой химии
ФГБОУ ВО «Иркутский государственный университет»,
доктор химических наук, профессор
Витковская Надежда Моисеевна



Н.М. Витковская

664003 г. Иркутск, ул. К. Маркса, 1

Тел. +7(3952)521211

e-mail: vita@cc.isu.ru

