

ОТЗЫВ

об автореферате 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

Диссертационная работа Краснощекова С. В. посвящена теоретическому описанию низковозбужденных ангармонических колебательных состояний и вероятностей переходов в полужестких многоатомных молекулах в свободном состоянии. Она суммирует работы диссертанта, выполненные на протяжении более чем 30-ти лет. Решающими аргументами в пользу высокой положительной оценки представленной работы являются (1) сделанный автором акцент на глубокую *аналитическую* проработку задачи и (2) реализация *теоретических* результатов в виде компьютерного кода (авторский пакет ANCO). Последнее обстоятельство заслуживает сугубого одобрения, поскольку часто раздаваемый совет «не изобретать велосипед», а крутить уже изобретённый, исходит от производителей велосипедов, купивших лицензию у других изобретателей и желающих отбить свои вложения. Последовавшие данному совету «тренируют ноги», как было сказано в старом советском фильме, пренебрегшие же им, напротив, развивают «память и речь» пусть и не с самым удобным пользовательским интерфейсом.

Автореферат диссертации получился довольно насыщенным, что делает непростой задачу оценки технических деталей. Представляются уместными два замечания, не снижающие, однако, положительную оценку работы. Так уравнение (60) автореферата оставляет открытым вопрос об исключении поворотов на не малые углы, переставляющих эквивалентные ядра исходной конфигурации. Также представляется переоцененной роль возможности получить аналитическое решение задачи 4x4: спору нет, формула Кардано-Феррари имеет место быть, но кто видел её применение в общем виде (конец главы 4)?

В целом диссертационная работа Краснощекова С. В. по объему, научной новизне, обоснованности выбора методов, обсуждения результатов и выводов соответствует всем требованиям, предъявляемым ВАК к докторским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия. Автореферат адекватно отражает содержание диссертации.

в.н.с., д.ф.-м.н.

Чугреев Андрей Львович

11 мая 2017 г.

ФГБУН Институт физической химии и электрохимии
им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук (ИФХЭ РАН).

Почтовый адрес:

119071, Москва, Ленинский пр-т, д.31, корп.4

Тел.: +7-495-955-46-16

e-mail: andrei.tchougreeff@gmail.com

Подпись Чугреева
Андрея Львовича
заверю:
С.И.С.И.
ОТДЕЛА
12 05 2017 г.