

Отзыв научного руководителя

на диссертационную работу Добролюбова Егора Олеговича на тему: «**Реализация колебательно-вращательной теории возмущений высоких порядков и интерпретация спектров высокого разрешения ^{13}C -дифторхлорметана в области $770\text{--}805\text{ см}^{-1}$** »,

представленную к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия

Добролюбов Егор Олегович окончил специалитет химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова в 2022 г. с отличием и в том же году поступил в очную аспирантуру.

Ключевой особенностью диссертационной работы Добролюбова Е.О. является её мультидисциплинарность, поскольку для решения поставленной основной задачи физической химии – глубокой интерпретации инфракрасного спектра высокого разрешения смеси изотопологов ^{13}C -обогащенного дифторхлорметана в газовой фазе – были использованы профессиональные инструменты высшей математики, информационных технологий, компьютерных наук и зарождающейся новой области науки – искусственного интеллекта.

Особая сложность работы была обусловлена фактическими свойствами указанного спектра, а именно высокой плотностью линий и наличием заметного инструментального шума. Более того, преобладание тяжелых атомов в молекуле (42 электрона) и значительное число нормальных мод (9), создало множество сложностей расчетного характера, которые были успешно преодолены благодаря проделанной работе и высокому уровню профессиональных знаний, как полученных за студенческие годы, так и приобретенных в процессе работы. Диссертационная работа не только решила хоть и очень сложную, но достаточно узкую задачу интерпретации спектра, но и также заложила прочную основу для будущего решения родственных задач интерпретации спектров высокого разрешения.

Раздел диссертации, посвященный ресуммированию рядов теории возмущений Релея-Шрёдингера, был нацелен на решения проблемы количественной оценки силы колебательных резонансов Ферми, и по этой теме была опубликована одна зачетная работа по молекуле OCS. Данный метод является нишевым и весьма полезен в контексте молекулярной спектроскопии.

Дополнительной проблемой, успешно решенной диссертантом, является неэмпирический расчет колебательно-вращательных интенсивностей переходов, которые представимы на основе разработанного удобного вида оператора эффективного дипольного момента. Это представляет немалую самостоятельную ценность, а разработанная схема расчета была использована в основной задаче.

Не будет преувеличением сказать, что решенная основная задача – интерпретация спектра дифторхлорметана – представляла собой вызов и для профессиональных спектроскопистов, что подтверждается как имеющимися публикациями, так и многими устными оценками специалистов, в том числе на международной конференции, на которой был сделан устный доклад. По сути, разработанный комплекс теоретических положений, практических методик и программного обеспечения закладывает основы нового научного направления на химическом факультете МГУ и обеспечивает преемственность традиционно высокого уровня научных исследований, характерного для кафедры физической химии.

Добролюбов Е.О. имеет несомненный талант в области математики и компьютерных наук и ему удалось его в полной мере раскрыть посредством высокого качества работы и успешным решением проблемы, представляющий интерес для физической химии. Особо следует отметить глубокий интерес диссертанта к фундаментальной науке в целом и редкая способность быстро решать нестандартные задачи, невзирая на их новизну и сложность.

Результаты работы были неоднократно представлены в виде устных и стендовых докладов на различных российских и международных конференциях.

Основные результаты по теме диссертации изложены в 3 статьях общим объемом 5.9 п.л., опубликованных в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базе ядра Российского индекса научного цитирования «eLibrary Science Index» и рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Считаю, что диссертационная работа Добролюбова Егора Олеговича представляет собой успешно завершённое научное исследование. По актуальности, новизне, объёму выполненных исследований и практической значимости работа полностью соответствует требованиям пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, предъявляемым к кандидатским диссертациям и может быть рекомендована для защиты в диссертационном совете МГУ имени М.В. Ломоносова.

«27» апреля 2026

Ведущий научный сотрудник
химического факультета ФБГОУ ВО
«Московский государственный
университет имени М.В. Ломоносова»,
доктор физико-математических наук

Краснощеков Сергей Вадимович
г. Москва, Ленинские горы 1 с. 3
Тел: +7 (495) 939-24-13
e-mail: sergeyk@phys.chem.msu.ru

Личную подпись Крас
ЗАВЕРЯЮ
Нач. отдела делопроизв
химического факультета

стина Т.А.