

Заключение диссертационного совета МГУ.014.3

по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Решение диссертационного совета от «26» июня 2026 г. № 198

о присуждении Добролюбову Егору Олеговичу, гражданину Российской Федерации,
ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Реализация колебательно-вращательной теории возмущений высоких порядков и интерпретация спектров высокого разрешения ^{13}C -дифторхлорметана в области 770–805 см^{-1} » по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите диссертационным советом 15.05.2026, протокол № 196.

Соискатель Добролюбов Егор Олегович 1998 года рождения, обучается в очной аспирантуре химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» по специальности 1.4.4. Физическая химия с 01.10.2022 г. по настоящее время.

Соискатель работает младшим научным сотрудником лаборатории компьютерного моделирования биомолекулярных систем и наноматериалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля» Российской академии наук.

Диссертация выполнена в лаборатории квантовой химии и молекулярного моделирования кафедры физической химии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Научный руководитель – доктор физико-математических наук Краснощеков Сергей Вадимович, ведущий научный сотрудник лаборатории квантовой химии и молекулярного моделирования кафедры физической химии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Официальные оппоненты:

1. Перевалов Валерий Иннокентьевич, доктор физико-математических наук, Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук, отделение спектроскопии атмосферы, лаборатория теоретической спектроскопии, главный научный сотрудник;

2. Тупикина Елена Юрьевна, кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, институт химии, кафедра физической органической химии, доцент;
3. Столяров Андрей Владиславович, доктор физико-математических наук, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, кафедра лазерной химии, заведующий кафедрой;

дали положительные отзывы на диссертацию.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их компетентностью в области физической химии и молекулярной спектроскопии, что подтверждается наличием публикаций в международных рецензируемых изданиях в соответствующей сфере исследования.

Соискатель имеет 12 опубликованных работ, из них 3 статьи по теме диссертации и в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности и отрасли наук.

1. Dobrolyubov E.O., Polyakov I.V., Millionshchikov D.V., Krasnoshchekov S.V. Vibrational resonance phenomena of the OCS isotopologues studied by resummation of high-order Rayleigh-Schrödinger perturbation theory // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2024. – Vol. 316. – P. 108909. EDN: MZCDKC. 2.1 п.л. Вклад автора 70%. Импакт-фактор 1.9 (JIF).
2. Добролюбов Е.О., Мануйлов В.М., Краснощеков С.В. Предсказание колебательно-вращательного спектра поглощения полосы ν_2 молекулы $D_2^{16}O$ решением прямой задачи операторным методом возмущений и уточнение эффективных вращательных гамильтонианов // Вестник Московского университета. Серия 2: Химия. – 2024. – Т. 65, № 4. – С. 292-305. EDN: HZMRRX. 1.1 п.л. Вклад автора 70%. Импакт-фактор 0.32 (РИНЦ).

Dobrolyubov E.O., Manuylov V.M., Krasnoshchekov S.V. A Prediction of the Vibration-Rotation Absorption Spectra of the $D_2^{16}O$ Molecule ν_2 Band by Solving the Operator Perturbation Theory Direct Problem and a Refinement of the Effective Rotational Hamiltonians // Moscow University Chemistry Bulletin. – 2024. – Vol. 79. – pp. 246 – 256. EDN: LUWHTN. 1.1 п.л. Вклад автора 70%. Импакт-фактор 0.5 (JIF).

3. Dobrolyubov E.O., Efremov I.M., Krasnoshchekov S.V., Polyakov I.V., Laptev V.B., Klimin S.A., Millionshchikov D.V., Naumenko O.V. High-resolution ro-vibrational analysis of HCFC-22: Deciphering ν_4 and $2\nu_6$ bands of $^{12}\text{CH}^{35}\text{ClF}_2$ and ν_4 band of $^{13}\text{CH}^{35}\text{ClF}_2$ species // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2026. – Vol. 348. – P. 109721. EDN: UWIPJH. 2.7 п.л. Вклад автора 55%. Импакт-фактор 1.9 (JIF).

На диссертацию и автореферат поступило 4 дополнительных отзыва, все положительные.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором теоретических исследований и анализа экспериментального инфракрасного спектра высокого разрешения предложен неэмпирический подход к построению эффективных операторов дипольного момента и предсказанию интенсивностей колебательно-вращательных переходов, реализован и применён к изотопологам карбонилсульфида метод анализа колебательных резонансов на основе ресуммирования рядов теории возмущений Релея–Шрёдингера высоких порядков, выполнена интерпретация спектра изотополога $^{13}\text{CH}^{35}\text{ClF}_2$ в области 770–805 см^{-1} .

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Идентификация более 3750 колебательно-вращательных переходов полосы ν_4 изотополога дифторхлорметана $^{13}\text{CH}^{35}\text{ClF}_2$ в диапазоне 770–805 см^{-1} позволяет определить более 2100 эмпирических уровней энергии, которые могут быть описаны эффективным А-редуцированным резонансным гамильтонианом Ватсона диады $\nu_4 / \nu_6 + \nu_9$ со среднеквадратичной ошибкой $2.65 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$.
2. Реализация колебательно-вращательной операторной теории возмущений Ван-Флека с использованием техники нормального упорядочения операторов углового момента J_z , $J_{\pm}$ и функций Вигнера $D_{0,\epsilon}^1$ с учётом вращательной редукции систематически решает проблему неэмпирического расчёта эффективных операторов дипольного момента.
3. Моделирование колебательных резонансов ряда изотопологов карбонилсульфида с помощью ресуммирования рядов теории возмущений Релея–Шрёдингера на основе неэмпирической геометрии и ангармонической поверхности потенциальной энергии,

полученных методом CCSD(T)/cc-pV(Q+d)Z, даёт высокоточную количественную информацию об их колебательных резонансах и полиадных структурах.

На заседании 26.06.2026 диссертационный совет принял решение присудить Добролюбову Е.О. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 8 докторов наук по специальности 1.4.4. Физическая химия (физико-математические науки), участвовавших в заседании, из 21 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за 17, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель

диссертационного совета

Горюнков А.А.

Ученый секретарь

диссертационного совета

Шилина М.И.

26.06.2026