

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Добролюбова Егора Олеговича «Реализация колебательно-вращательной теории возмущений высоких порядков и интерпретация спектров высокого разрешения ^{13}C -дифторхлорметана в области $770\text{--}805\text{ см}^{-1}$ », представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 физическая химия.

Диссертация Е.О. Добролюбова посвящена развитию теоретических методов молекулярной спектроскопии и их применению к анализу спектров молекул. Следует отметить следующие основные результаты работы.

Предложен метод построения эффективного оператора дипольного момента для молекул типа асимметричного волчка, учитывающий редукцию эффективного вращательного гамильтониана к трехдиагональной форме. Метод применен для расчета интенсивностей линий полосы ν_2 молекул D_2O и SO_2 и показано, что учёт редукции улучшает согласие рассчитанных интенсивностей с результатами высокоточного вариационного расчёта.

Реализована теория возмущений Релея–Шрёдингера высоких порядков с использованием нормально упорядоченных лестничных операторов. На основе *ab initio* внутримолекулярной потенциальной функции карбонилсульфида рассчитаны ряды теории возмущений до 210-го порядка. Для суммирования рядов применены многозначные алгебраические аппроксиманты Эрмита-Паде. Проведен анализ колебательного энергетического спектра изотопологов карбонилсульфида, относящихся к первым 18 резонансным полиадам. Найдены и количественно охарактеризованы все возможные ангармонические резонансы, включая и межполиадные.

Проведен теоретический анализ экспериментального спектра высокого разрешения молекулы $^{13}\text{CH}^{35}\text{ClF}_2$ в области $770\text{--}805\text{ см}^{-1}$. Идентифицированы более 3750 колебательно-вращательных линий, принадлежащих полосе ν_4 , восстановлено более 2100 экспериментальных уровней энергии верхнего колебательного состояния. Решена обратная задача, определены

вращательные, центробежные и резонансные постоянные диады состояний v_4/v_6+v_9 , воспроизводящие экспериментальные уровни с высокой точностью $2.65 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$. Данный результат является уникальным, поскольку интерпретация спектра сильно затруднена большой плотностью линий в спектре. Это потребовало применения различных способов анализа, как точных квантово – механических (метод комбинационных разностей, эффективный гамильтониан и эффективный оператор дипольного момента), так качественных эмпирических правил (диаграммы Лумиса – Вуда).

Диссертация Е. О. Добролюбова выполнена на высоком научном уровне. В ней рассмотрены новые, современные теоретические методы и способы анализа спектров, получен большой объем практически важной информации. Считаю, что диссертация удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 физическая химия, а автора – заслуживающим присуждения искомой степени.

Главный научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева» Сибирского отделения Российской академии наук. Почтовый адрес: 634055, г. Томск, пл. Академика Зуева, д.1, e-mail: bykov@iao.ru, Телефон: +7 (3822) 491-751.
Доктор физико-математических наук по специальности 01.04.05—«Оптика», профессор по специальности «Оптика».

Быков Александр Дмитриевич

10.06.2026 г.

Подпись А.Д. Быкова заверяю
Ученый секретарь ИОА СО РАН

к.ф.-м.н.

10.06.2026 г.

Кураева Т.Е.