

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.

Диссертационная работа Добролюбова Егора Олеговича сочетает в себе развитие теоретических методов, их программную реализацию и применение к анализу инфракрасных (ИК) спектров высокого разрешения. Актуальность работы обусловлена тем, что ИК спектры газовых сред используются для дистанционного исследования удалённых объектов, включая атмосферу Земли и экзопланет, а успешность и надёжность такого рода исследований во многом определяются точностью и доступностью в базах данных спектральных параметров отдельных молекул. Нужно заметить, что дифторхлорметан является атмосферным загрязнителем, при этом вращательная структура ИК спектров его ^{13}C -замещенных модификаций ранее практически не изучалась.

В работе был развит метод расчёта эффективных операторов дипольного момента асимметричных волчков. Для этого используется теория возмущений Ван-Флека с техникой нормального упорядочения операторов. Реализация проверена на примере полосы ν_2 молекулы D_2O и показывает, что учёт вращательной редукции улучшает согласие предсказанных интенсивностей с высокоточными вариационными данными. Это подтверждает корректность и практическую значимость предложенной в работе реализации теории возмущений.

Важный практический результат связан с анализом ИК спектра высокого разрешения $^{13}\text{CH}^{35}\text{ClF}_2$ в области $770\text{--}805\text{ см}^{-1}$. Такое исследование было выполнено впервые, и идентифицированная автором совокупность колебательно-вращательных переходов открывает новые возможности для

учёта вклада этой молекулы в атмосферные спектры с помощью полученных в работе данных.

Кроме того, в работе реализован метод ресуммирования рядов теории возмущений Релея-Шрёдингера высоких порядков. Метод был применён для неэмпирического исследования резонансов шести изотопологов OCS между колебательными состояниями первых 18 полиад, что в систематической манере описывает ангармонические взаимодействия полос в весьма широком диапазоне волновых чисел.

Научная новизна работы заключается в получении новых спектральных данных для $^{13}\text{CH}^{35}\text{ClF}_2$, разработке подхода к расчету эффективных операторов дипольного момента и систематическом анализе ангармонических резонансов изотопологов карбонилсульфида. Практическая значимость связана с использованием полученных параметров при формировании списков линий и построении эффективных спектроскопических моделей.

Достоверность полученных результатов вполне обоснована. В работе используются стандартные для спектроскопии подходы к колебательно-вращательному анализу, а предсказанные величины сопоставляются с литературными данными – как эмпирическими, так и теоретическими. Текст автореферата написан последовательно и логично. Основные результаты отражены в 3 статьях из рецензируемых научных журналов, а также были представлены на нескольких международных и всероссийских конференциях.

В качестве вопросов и замечаний хотелось бы привести следующее:

1. Из автореферата не вполне ясно, насколько разработанные методы являются универсальными, а насколько они адаптированы к исследованным молекулам. Было бы полезно в автореферате уделить этому больше внимания.

2. Методика расчётов для поиска резонансов ресуммированием описана весьма кратко. В частности, неясно, зачем в расчёте участвуют ряды 210-го порядка.

3. Можно ли использовать предложенный метод расчёта эффективных операторов дипольного момента для предсказания микроволновых спектров?

Кроме того, в тексте в нескольких местах встречаются опечатки и стилистические неточности.

Эти замечания, однако, не снижают положительной оценки работы. Считаю, что диссертация Добролюбова Егора Олеговича соответствует критериям, определённым пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Старший научный сотрудник отдела микроволновой спектроскопии
Федерального государственного бюджетного научного учреждения
«Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им.
А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук»,

адрес: 603950, г. Нижний Новгород, ул. Ульянова, д. 46

тел.: +7 (831) 436-62-02,

эл. почта: zobov@ipfran.ru

кандидат физико-математических наук

специальность 01.04.03 – Радиофизика,

23 июня 2026 г.

Зобов Николай Федорович

Подпись Н.Ф. Зобова удостоверяю

Ученый секретарь ИПФ РАН

Кандидат физико-математических наук

И.В. Корюкин