

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Добролюбова Егора Олеговича «Реализация колебательно-вращательной теории возмущений высоких порядков и интерпретация спектров высокого разрешения ^{13}C -дифторхлорметана в области $770\text{--}805\text{ см}^{-1}$ » предоставленной на соискание

ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. –

Физическая химия.

Диссертационная работа Е.О. Добролюбова посвящена актуальной проблеме современной молекулярной спектроскопии – разработке и применению теоретических методов для интерпретации сложных колебательно-вращательных спектров высокого разрешения. Работа выполнена на стыке квантовой химии, теоретической спектроскопии и вычислительной физики и имеет как фундаментальную, так и практическую направленности.

Актуальность темы не вызывает сомнений. С одной стороны в работе выполнен анализ спектров дифторхлорметана, который является важным атмосферным загрязнителем с озоноразрушающим потенциалом, что делает получение точных спектральных данных критически важным для задач экологического мониторинга. С другой стороны, разработка и развитие неэмпирических методов расчета эффективных гамильтонианов и операторов дипольного момента на основе теории возмущений Ван-Флека и ресуммирования рядов Релея-Шрёдингера является одним из самых перспективных направлений в теоретической спектроскопии. Особую значимость работе придает исследование изотопологических модификаций молекул, что расширяет базу данных для фундаментальных исследований.

Научная новизна работы представлена рядом новых важных результатов. Впервые выполнен детальный анализ спектра высокого разрешения изотополога $^{13}\text{CH}^{35}\text{ClF}_2$ в области $770\text{--}805\text{ см}^{-1}$. Автором идентифицировано более 3750 переходов, на основе которых получено более 2100 эмпирических уровней энергии. Вся эта совокупность уровней энергии была воспроизведена с высокой точностью в рамках эффективной модели взаимодействующей диады $\nu_4/\nu_6+\nu_9$, что является важным вкладом в спектроскопию данного соединения. Предложен оригинальный подход к расчету эффективных операторов дипольного момента для молекул типа асимметричного волчка, основанный на технике нормального упорядочения и учитывающий преобразования вращательной редукции. Впервые проведен систематический анализ ангармонических резонансов для шести изотопологов карбонилсульфида (OCS) с использованием метода ресуммирования рядов ТВРШ высоких порядков (до 210-го порядка), что позволило

количественно охарактеризовать как внутриволиадные, так и межволиадные взаимодействия в широком энергетическом диапазоне.

Достоверность результатов подтверждается хорошим согласием с литературными данными, а также качественным воспроизведением, на основе предложенного списка линий, спектра дифторхлорметана. Достоверность предложенной эффективной модели взаимодействующей диады $\nu_4/\nu_6+\nu_9$ дифторхлорметана подтверждается малым среднеквадратичным отклонением рассчитанных положений линий от измеренных. ($RMS = 2.65 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ для $^{13}\text{CH}^3\text{ClF}_2$).

Практическая значимость диссертационной работы заключается в том, что впервые получены параметры спектральных линий полосы ν_4 ^{13}C -изотополога дифторхлорметана, которые могут быть включены в международные базы данных и использованы для дистанционного мониторинга атмосферы Земли. С другой стороны, предложенные в работе вариации метода КП и теории возмущений Релея-Шрёдингера, а также выполненные с помощью этих теорий расчеты, несомненно, имеют теоретическую значимость.

Структура автореферата логична и информативна. В нем четко сформулированы цель, задачи, новизна, положения, выносимые на защиту, и выводы. Представленный материал свидетельствует о глубоком понимании автором как теоретических основ, так и прикладных аспектов спектроскопии высокого разрешения. Публикации автора (3 статьи в ведущих рецензируемых журналах из ядра РИНЦ и Web of Science) полностью отражают содержание работы, а апробация на представительных международных конференциях подтверждает ее высокий уровень.

В качестве основных замечаний по тексту автореферата можно отметить следующее:

1. Во введении в качестве объектов исследования указаны D_2O и SO_2 , но о них ничего не говорится в разделе «Степень разработанности темы.»
2. В третьем защищаемом положении озадачивает словосочетание «неэмпирическая геометрия», возможно в тексте диссертации это понятие раскрыто. Кроме того неясно насколько точна «высокоточная информация», которое дает защищаемое в этом положении моделирование. Это понятие расплывчато.
3. На странице 11 утверждается (Раздел 1.2). «В используемой двухстадийной схеме на первом этапе удаляются все колебательно недиагональные члены гамильтониана.» Насколько мне известно, формализм Ван-Флека не позволяет удалить резонансные недиагональные элементы, и, следовательно, данное утверждение неверно.
4. На странице 20 утверждается (Раздел 4.5). «В частности, обсуждается эффект изотопического замещения $^{12}\text{C} \rightarrow ^{13}\text{C}$ на вращательную структуру Р и R-ветвей, в

результате которого возникают характеристические группы линий.» Возникает вопрос: «Действительно ли такие характеристические группы линий отсутствуют в спектре основного изотополога?»

Кроме того в тексте имеются опечатки и стилистические ошибки. В частности, 2 раза пропущено слово «в зависимости», в предложениях на странице 18 «На рисунке 2.6 представлен график отношений интенсивностей от абсолютной...», и на странице 19 «Влияние поправок к интенсивностям от преобразований...».

Однако указанные замечания не снижают общей высокой оценки диссертационного исследования и носят скорее рекомендательный и дискуссионный характер.

Оценивая представленные в автореферате результаты работы, считаю что работа соответствует критериям, определённым пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», а ее автор, Егор Олегович Добролюбов, безусловно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия.

Старший научный сотрудник Лаборатории теоретической спектроскопии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук, доктор физико-математических наук по специальности 1.3.6 - Оптика.

Люлин Олег Михайлович

23.06.2026

Почтовый адрес: 634055, Россия, г. Томск,
площадь Академика Зуева, 1.
e-mail: ol@iao.ru
раб. тел.: +7 (9822)491111 доп. 1208

Подпись Люлина Олега Михайловича удостоверяю

Ученый секретарь ИОА СО РАН

к.ф.-м.н. по специальности

01.04.05 – Оптика

Кураева Татьяна Еремеевна