

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Берёзкина Кирилла Борисовича «Инфракрасная спектроскопия высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ », представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Диссертационная работа Берёзкина К.Б. посвящена исследованию инфракрасных спектров высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ на основе теоретической модели эффективного гамильтониана с учетом резонансных взаимодействий. Хорошо известно, что исследование колебательно-вращательных спектров молекулы этилена и ее изотопологов является актуальной проблемой как с точки зрения решения практических задач атмосферной оптики, астрофизики и планетологии, так и теоретических задач химической физики. В первом случае этилен представляет интерес, так как входит в состав атмосферного воздуха и его концентрация оказывает существенное влияние на климат, он играет значительную роль в тропосферной химии и производстве озона; этилен обнаружен в атмосферах планет-гигантов и их спутников; он является фитогормоном, что приводит к его интенсивным исследованиям в биохимии растений, физиологии метаболизма млекопитающих. С другой стороны, решение многих теоретических задач упрощается, если корректно определена внутримолекулярная потенциальная функция многоатомной молекулы, а это становится возможным при исследовании ее изотопических модификаций, в том числе асимметричной дейтерированной модификации молекулы этилена $\text{CH}_2=\text{CD}_2$, интерес к которой обусловлен наличием в ее спектрах колебательных полос, отличных от основной молекулы. Это дает возможность использовать полученные данные для более полного описания свойств молекулы этилена.

Следует отметить научную и практическую значимость результатов работы, которая заключается, во-первых, в формулировке и построении эффективного гамильтониана молекулы с учетом многочисленных резонансных взаимодействий; во-вторых, в проведении расчетов интенсивностей линий и их полуширин, получении набора параметров эффективного дипольного момента молекулы и коэффициентов самоуширения линий; и, в-третьих, в проведенных в работе расчетах параметров спектральных линий, таких как положения линий, энергии переходов, интенсивности и коэффициенты уширения, которые являются дополнением к имеющимся спектроскопическим банкам данных HITRAN и GEISA. Полученные новые данные позволяют скорректировать *ab initio* расчеты структуры и параметров поглощения молекулы, получить более точную информацию о внутримолекулярной потенциальной функции основной модификации молекулы этилена.

Описанные в автореферате исследования имеют достаточно завершённый характер, начиная от общих теоретических методов, проведенных экспериментальных исследований, до результатов количественных расчетов характеристик изотополога $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ этилена. В подавляющем большинстве полученные автором диссертации результаты являются новыми. Новые

результаты в теории подтверждают научную значимость проведенных исследований. Достоверность результатов и выводов не вызывает сомнений.

В целом диссертационная работа «Инфракрасная спектроскопия высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ » является законченным научным исследованием. Судя по автореферату диссертации, можно сделать вывод, что работа соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Берёзкин Кирилл Борисович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Профессор кафедры
прикладной математики ФГБОУ ВО ТГАСУ,
доктор физико-математических наук, с.н.с.

Г.А. Онопенко

Онопенко Галина Александровна, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Томский государственный архитектурно-строительный университет»
634003, г. Томск, площадь Соляная, д. 2,
тел. (3822) 65-93-58,
e-mail: galex_on@mail.ru

19.11.2018 г.

Подпись Онопенко Г.А. заверяю
Ученый секретарь ФГБОУ ВО ТГАСУ
кандидат технических наук, доцент

Ю.А. Какушкин

тел. (3822) 65-32-61
e-mail: canc@tsuab.ru
<https://www.tsuab.ru>

