

## ОТЗЫВ

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

В диссертации Березкина К.Б. представлены результаты комплексного – экспериментального и теоретического исследования спектров высокого разрешения дважды дейтерированной асимметричной изотопической модификации этилена – молекуле  $\text{CH}_2=\text{CD}_2$  в широкой спектральной области от 600 до  $2000\text{ см}^{-1}$ .

**Актуальность исследования.** Изучение колебательных и колебательно – вращательных спектров поглощения, излучения и рассеяния углеводородных молекул представляют значительный интерес как для приложений в различных практических задачах, так и для развития теоретических методов, включая неэмпирический подход. Интерес к молекуле этилена, а также её дейтериевым модификациям, обусловлен тем, что данная молекула является простейшим представителем класса непредельных углеводородов, что обеспечивает ей особое место с точки зрения изучения внутримолекулярной динамики. Задачей работы являются как измерения спектров, так и определение теоретических моделей, способных воспроизводить экспериментальные спектры на уровне точности измерений. Поэтому тема диссертации, цель и решаемые задачи являются актуальными.

**Содержание работы.** Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и списка цитируемой литературы.

В первой главе диссертации приведён обзор ряда теоретических методов исследования, примененных для анализа измеренных спектров. В частности, рассматриваются процедура построения гамильтониана молекулы, свойства симметрии и классификация колебательных состояний, используемые приближения, построение эффективных операторов энергии и дипольного момента, основные моменты теории изотопозамещения в молекулах. Также описаны основные принципы Фурье-спектроскопии и методика измерений.

Во второй главе представлены результаты измерений спектров молекулы  $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ . Эта часть работы выполнена в Техническом университете Брауншвейга и Наньянском техническом университете Сингапура. Приводится

описание экспериментальной установки, условий измерений, анализируется спектральное разрешение с учётом уширения линий, представлено описание измеренных спектров. Необходимо отметить, что измеренные спектры представляют уникальный источник экспериментальной информации о молекуле  $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ , измерения проведены с высоким разрешением в широком спектральном диапазоне, содержащем около 17000 линий. Измерены спектры при различной длине оптического пути, от 0.8 м до 24 м., различных давления от 7 до 800 Па, при температурах 296 и 353 К.

В третьей главе представлены результаты теоретического анализа спектров. Проведена интерпретация линий в спектрах, найдено и идентифицировано около 17000 линий, около половины из них наблюдались впервые. С учётом микроволновых данных определены энергетические уровни, проведены оценки центров полос и параметров резонансных взаимодействий. Методом наименьших квадратов решена обратная задача, определены вращательные, центробежные и резонансные постоянные, воспроизводящие исходный спектр с точностью, близкой к точности измерений. Проведено исследование интенсивностей и полуширин спектральных линий при этом использовался контур Армана – Тран. На основе полученных данных были определены параметры эффективного дипольного момента ряда колебательных полос.

В Заключение приводятся основные результаты работы.

Оценивая в целом диссертационную работу Березкина К. Б., считаю необходимым отметить следующее.

**Научная значимость и практическая ценность работы.** В диссертации Березкина К.Б. представлены результаты измерений и теоретического анализа спектров высокой точности. Полученные при этом спектроскопические данные содержат уникальную информацию о различных молекулярных характеристиках и внутримолекулярной динамике. Эти новые данные должны применяться для уточнения *ab initio* методов, определения функции потенциальной энергии и дипольного момента. Предложенные автором теоретические модели, описывающие колебательно – вращательный энергетический спектр на уровне точности измерений, можно использовать для расширения списка линий молекулы  $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ , в исследуемом спектральном диапазоне. Измеренные спектроскопические характеристики линий, результаты

анализа спектров, интенсивности и коэффициенты уширения линий представляют весомый вклад в развитие банков спектроскопических данных, таких как HITRAN и GEISA.

**Достоверность** представленных в диссертации результатов и выводов, конкретных данных об энергетических уровнях, линиях и полосах поглощения, вращательных, центробежных и резонансных постоянных несомненна. Они обоснованы основными принципами квантовой механики, использованием хорошо разработанных теоретических методов, таких как метод комбинационных разностей, операторная теория возмущений, теория изотопозамещения в молекулах. Достоверность предложенных в работе теоретических моделей доказывается также хорошим согласием между рассчитанными и экспериментальными спектрами.

**Новизна результатов диссертации** также несомненна. Автор впервые представил обширный набор измеренных центров и интенсивностей линий. Впервые определены из спектров уровни ряда высоковозбужденных вращательных состояний, определены параметры эффективного гамильтониана, эффективного дипольного момента, интенсивности линий и коэффициенты уширения собственным давлением и т.д.

Результаты диссертационной работы Березкина К.Б. опубликованы в 9 статьях, в научных изданиях, имеющих высокий рейтинг («Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer», «Известия ВУЗОВ. Физика»), а также докладывались на Российских и Международных конференциях.

**Личный вклад соискателя** очевиден, он заключается в участии в планировании эксперимента, проведении измерений, обработке спектров, решении обратных задач и обсуждении результатов.

#### **Недостатки работы и замечания .**

1) Некоторые разделы диссертации изложены в излишне упрощенном виде. Например, раздел 1.1.2 «Эффективный гамильтониан. Редукция» содержит довольно длинную вводную часть общего характера, объясняющую идею метода контактных преобразований. В то же время, разработанные к настоящему времени для этого метода весьма эффективные вычислительные приемы, упоминаются только в виде нескольких ссылок.

2) В тексте имеются неудачные или неверные утверждения. На рис. 3.3 автор приводит график зависимости статсуммы от  $J$ . В действительности



статистическая сумма не зависит от квантового числа  $J$ . На стр. 4, «нотация Кроуфорда» вместо «обозначения Кроуфорда»; на стр. 8, «измерить экспериментальные интенсивности» вместо «измерить интенсивности»; стр. 36, соотношение (1.6) названо спектром поглощения, правильный термин – оптическая толща; стр. 64, указывается что « $\Delta$  – неопределенность значений энергии ... рассчитывается как среднее значение энергий...» и т.д.

**Заключение.** Замеченные недостатки диссертации не влияют на результаты и выводы работы и не препятствуют ее положительной оценке. Диссертационная работа Березкина К.Б. выполнена на высоком научном уровне и содержит новые результаты необходимые для различных приложений. Автореферат диссертации точно отражает ее содержание.

Считаю, что в диссертации Березкина Кирилла Борисовича «Инфракрасная спектроскопия высокого разрешения молекулы  $\text{CH}_2=\text{C}_6\text{H}_2$ » представлено решение актуальной научной задачи, она содержит новые результаты, имеющие существенное научное значение. Диссертация соответствует требованиям п. 9 действующего «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Автор диссертации, Березкин Кирилл Борисович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Официальный оппонент  
главный научный сотрудник лаборатории молекулярной спектроскопии,  
доктор физико-математических наук (01.04.05 – оптика),  
профессор

Быков Александр Дмитриевич  
e-mail adbykov@rambler.ru

12 ноября 2018 г.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева  
Сибирского отделения Российской академии наук  
634055, Россия, Томск, площадь Академика Зуева, 1.  
Тел. (3822) 492738. Факс (3822) 492085.  
E-mail: director@iao.ru. Веб-сайт: <https://www.iao.ru>.

Подпись А.Д. Быкова удостоверяю  
Ученый секретарь ИОА СО РАН,  
кандидат физико-математических наук



О. В. Тихомирова