

СВЕДЕНИЯ О РЕЗУЛЬТАТАХ ПУБЛИЧНОЙ ЗАЩИТЫ ДИССЕРТАЦИИ

Диссертационный совет Д 212.267.04, созданный на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», извещает о результатах состоявшейся 29 ноября 2018 года публичной защиты диссертации Берёзкина Кирилла Борисовича «Инфракрасная спектроскопия высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ » по специальности 01.04.05 – Оптика на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

На заседании присутствовали 22 из 25 членов диссертационного совета, в том числе 6 докторов наук по специальности 01.04.05 – Оптика:

- | | |
|--|----------|
| 1. Войцеховский А. В., доктор физико-математических наук, профессор, заместитель председателя диссертационного совета, | 01.04.05 |
| 2. Пойзнер Б. Н., кандидат физико-математических наук, профессор, учёный секретарь диссертационного совета, | 01.04.03 |
| 3. Артюхов В. Я., доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, | 01.04.21 |
| 4. Беличенко В. П., доктор физико-математических наук, доцент, | 01.04.03 |
| 5. Дмитренко А. Г., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.03 |
| 6. Донченко В. А., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.21 |
| 7. Дунаевский Г. Е., доктор технических наук, профессор, | 01.04.03 |
| 8. Кабанов М. В., член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.05 |
| 9. Козырев А. В., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.03 |
| 10. Копылова Т. Н., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.21 |
| 11. Кузнецова Р. Т., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.05 |
| 12. Лосев В. Ф., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.21 |
| 13. Соколова И. В., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.21 |
| 14. Солдатов А. Н., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.21 |
| 15. Соснин Э. А., доктор физико-математических наук, | 01.04.05 |
| 16. Тарасенко В. Ф., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.21 |
| 17. Улеников О. Н., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.05 |
| 18. Фисанов В. В., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.03 |
| 19. Черепанов В. Н., доктор физико-математических наук, доцент, | 01.04.05 |
| 20. Шандаров С. М., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.03 |
| 21. Юдин Н. А., доктор технических наук, старший научный сотрудник, | 01.04.21 |
| 22. Якубов В. П., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.03 |

В связи с невозможностью присутствия на заседании председателя диссертационного совета доктора физико-математических наук, профессора Майера Георгия Владимировича по его письменному поручению заседание провёл заместитель председателя диссертационного совета доктор физико-математических наук, профессор Войцеховский Александр Васильевич.

По результатам защиты диссертации тайным голосованием (результаты голосования: за присуждение ученой степени – 21, против – 1, недействительных бюллетеней – нет) диссертационный совет принял решение присудить К. Б. Берёзкину учёную степень кандидата физико-математических наук.

**Заключение диссертационного совета Д 212.267.04,
созданного на базе федерального государственного автономного
образовательного учреждения высшего образования
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации,
по диссертации на соискание учёной степени кандидата наук**

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 29.11.2018 № 150

О присуждении **Берёзкину Кириллу Борисовичу**, гражданину Российской Федерации, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Инфракрасная спектроскопия высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ » по специальности **01.04.05** – Оптика принята к защите 20.09.2018 (протокол заседания № 146) диссертационным советом Д 212.267.04, созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, приказ о создании диссертационного совета № 714/нк от 02.11.2012).

Соискатель **Берёзкин Кирилл Борисович**, 1990 года рождения.

В 2014 году соискатель окончил федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

В 2018 году соискатель очно окончил аспирантуру федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

Работает в должности техника Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена в Исследовательской школе физики высокоэнергетических процессов федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» Министерства образования и науки Российской Федерации и в Междисциплинарной исследовательской лаборатории Карно-Бургундия Национального центра научных исследований в составе Докторской школы Карно-Пастер Университета Бургундии – Франш-Конте (Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne UMR 6303 CNRS UBFC).

Научные руководители:

доктор физико-математических наук, **Бехтерева Елена Сергеевна**, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Исследовательская школа физики высокоэнергетических процессов, профессор;

Habilitation à diriger des recherches, **Леруа Клод**, Университет Бургундии – Франш-Конте, междисциплинарная исследовательская лаборатория Карно-Бургундия Национального центра научных исследований (Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne UMR 6303 CNRS UBFC), профессор.

Официальные оппоненты:

Быков Александр Дмитриевич, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт оптики атмосферы им. В. Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория молекулярной спектроскопии, главный научный сотрудник

Краснощеков Сергей Вадимович, доктор физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», лаборатория строения и квантовой механики молекул кафедры физической химии, ведущий научный сотрудник

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «**Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук**», г. Нижний Новгород, в своём положительном отзыве, подписанном **Кошелевым Максимом Александровичем** (кандидат физико-математических наук, отдел микроволновой спектроскопии, старший научный сотрудник), **Хазановым Ефимом Аркадьевичем** (член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, заместитель директора) и **Третьяковым Михаилом Юрьевичем** (доктор физико-математических наук, отдел микроволновой спектроскопии, заведующий отделом), указала, что интерес к молекулам, относящимся к классу непредельных углеводородов (в частности этилену и его дейтерированным модификациям), обусловлен как требованиями развития теоретических подходов в спектроскопии (например, решением проблем, проявляющихся при рассмотрении сильных резонансных взаимодействий в многоатомных молекулах типа асимметричного волчка), так и прикладных исследований в области газоанализа, атмосферной оптики, физической химии и других областях науки. К. Б. Берёзкиным получены инфракрасные спектры высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ при различных давлениях, температурах и оптических толщах в спектральной области $600\text{--}1650\text{ см}^{-1}$, качество полученных спектров характеризуется возможностью наблюдения и анализа слабых линий «горячих», обертоновых и комбинационных полос; проинтерпретировано порядка 17 тысяч переходов с $J^{\text{max}} = 50$ и $K_a^{\text{max}} = 24$; впервые получены данные о ширинах и интенсивностях спектральных линий полос $2\nu_7$ и ν_2 ; с использованием экспериментальных данных решена обратная спектроскопическая задача с эффективными гамильтонианами, учитывающими резонансные взаимодействия между различными колебательными состояниями молекулы; получены спектроскопические параметры молекулы, а также информация о ширинах и интенсивностях линий, позволяющие моделировать спектры молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ в рассматриваемой области частот с точностью, близкой к экспериментальной. Результаты исследования имеют большое значение для развития современной колебательно-вращательной спектроскопии молекул:

регистрации и анализа спектров высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ и построении модели для их описания с экспериментальной точностью.

Соискатель имеет 17 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 15 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 9 работ (из них 3 статьи в зарубежном научном журнале, входящем в Web of Science, 6 статей в российском научном журнале, переводная версия которого входит в Web of Science), в сборниках материалов международных конференций (из них 4 зарубежных конференции) опубликовано 6 работ. Общий объём публикаций – 6,56 а.л., авторский вклад – 2,04 а.л.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем учёной степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации, опубликованные в журналах, включённых в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, на соискание учёной степени доктора наук:

1. Ulenikov O. N. Study of the high resolution FTIR spectrum of $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ in the region of 1300–1450 cm^{-1} : The ν_{12} (A_1) and $2\nu_{10}$ (A_1) bands / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **K. B. Berezkin**, E. A. Sklyarova, C. Maul, K.-H. Gericke, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2015. – Vol. 161. – P. 180–196. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2015.04.008. – 1,6 / 0,4 а.л. (*Web of Science*).

2. Ulenikov O. N. Study of resonance interactions in polyatomic molecules on the basis of highly accurate experimental data: Set of strongly interacting bands ν_{10} (B_1), ν_7 (B_2), ν_4 (A_2), ν_8 (B_2), ν_3 (A_1) and ν_6 (B_1) of $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **K. B. Berezkin**, N. V. Kashirina, T. L. Tan, C. Sydow, C. Maul, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2016. – Vol. 180. – P. 14–28. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.04.001. – 1,4 / 0,3 а.л. (*Web of Science*).

3. Фомченко А. Л. Определение констант форм колебаний молекулы C_2H_4 / А. Л. Фомченко, А. С. Белова, **К. Б. Берёзкин**, А. Г. Зяткова // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2016. – Т. 59, № 7. – С. 130–136. – 0,48 / 0,12 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Fomchenko A. L. Determination of Transformation Coefficients of the C_2H_4 Molecule / A. L. Fomchenko, A. S. Belova, **K. B. Berezkin**, A. G. Ziatkova // Russian Physics Journal. – 2016. – Vol. 59, is. 7. – P. 1062–1070. – DOI: 10.1007/s11182-016-0872-y.

4. **Берёзкин К. Б.** Спектроскопия высокого разрешения молекулы $CH_2=CD_2$: анализ «горячей» полосы $\nu_7+\nu_{10}-\nu_{10}$ / **К. Б. Берёзкин**, А. Л. Фомченко, Ю. С. Аслаповская, О. В. Громова, Е. С. Бехтерева, Г. К. Мауль // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60, № 4. – С. 3–6. – 0,46 / 0,3 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Berezkin K. B. High-Resolution Spectroscopy of the $CH_2=CD_2$ Molecule: Analysis of the Hot $\nu_7 + \nu_{10} - \nu_{10}$ Band / K. B. Berezkin, A. L. Fomchenko, Yu. S. Aslapovskaya, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, K. Maul // Russian Physics Journal. – 2017. – Vol. 60, is. 4. – P. 557–561. – DOI: 10.1007/s11182-017-1108-5.

5. **Берёзкин К. Б.** Исследование абсолютных интенсивностей линий поглощения полос $2\nu_7$ и ν_2 молекулы $CH_2=CD_2$ в диапазоне $1450-1650\text{ см}^{-1}$ / **К. Б. Берёзкин** // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2018. – Т. 61, № 3. – С. 112–115. – 0,23 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Berezkin K. B. Studying the absolute intensities of the absorption lines of $2\nu_7$ and ν_2 bands of the $CH_2=CD_2$ molecule in the region $1450-1650\text{ см}^{-1}$ / K. B. Berezkin // Russian Physics Journal. – 2018. – Vol. 61, is. 3. – P. 521–524. – DOI: 10.1007/s11182-018-1429-z.

На автореферат поступило 3 положительных отзыва. Отзывы представили:

1. **Н. И. Москаленко**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры энергомашиностроения Казанского государственного энергетического университета, *без замечаний*.
2. **Г. А. Онопенко**, д-р физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., профессор кафедры прикладной

математики Томского государственного архитектурно-строительного университета, *без замечаний*. **З. Н. Н. Лаврентьева**, д-р физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник лаборатории молекулярной спектроскопии Института оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, г. Томск, *без замечаний*.

В отзывах указывается, 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. К. Б. Берёзкиным получены новые экспериментальные спектры молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$, записанные с лучшей разрешающей способностью и для большего диапазона экспериментальных условий, чем это было сделано ранее; проведено исследование большого числа колебательно-вращательных полос, обнаружено значительное количество ранее неисследованных переходов; впервые измерены интенсивности и полуширины спектральных линий исследуемой молекулы; рассчитаны параметры спектральных линий, таких как положения линий, энергии переходов, интенсивности и коэффициенты уширения, которые являются дополнением к имеющимся спектроскопическим банкам данных HITRAN и GEISA; получен набор параметров эффективного дипольного момента молекулы и коэффициентов самоуширения линий. Результаты исследования позволяют скорректировать *ab initio* расчеты структуры и параметров поглощения молекулы, уточняют имеющуюся информацию о внутримолекулярной потенциальной функции основной модификации молекулы этилена.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что **А. Д. Быков** является известным специалистом в области спектроскопии внутри- и межмолекулярных взаимодействий; **С. В. Краснощеков** – высококвалифицированный специалист в области математической и квантовой химии, занимающийся расчётами колебательных спектров многоатомных молекул; **Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики РАН** – ведущий исследовательский центр, на базе которого проводятся исследования в области молекулярной спектроскопии.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

получена новая экспериментальная информация о спектрах молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$: зарегистрированы прежде не изученные колебательно-вращательные полосы, расширен диапазон значений вращательных квантовых чисел (J и K_a), измерены интенсивности и полуширины спектральных линий;

разработана модель, учитывающая резонансные взаимодействия в молекуле и позволяющая рассчитывать положения линий в спектре молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ с точностью порядка экспериментальной ($\sim 10^{-4} \text{ см}^{-1}$);

рассчитаны спектроскопические параметры эффективного гамильтониана молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$, параметры оператора эффективного дипольного момента, коэффициенты самоуширения спектральных линий.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

показано, что для описания вращательной структуры колебательных состояний молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ в рамках имеющихся экспериментальных данных необходимо и достаточно учитывать в диагональных блоках эффективного гамильтониана вклады от операторов углового момента до шестой степени включительно, а также рассматривать как взаимодействующие состояния, разница квантовых чисел K_a для которых не превышает шести;

применительно к проблематике диссертации результативно использованы методы теории групп, теории изотопозамещения, квантовой механики, операторной теории возмущений, методы Фурье-спектроскопии;

изложены методы и подходы, позволяющие разрешить проблемы, возникающие при анализе спектров сильно взаимодействующих колебательно-вращательных полос молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$, связанные с неоднозначностями в определении и сильной корреляцией спектроскопических параметров;

отмечена перспективность использования полученных данных о спектроскопических параметрах (вращательных, центробежного искажения, резонансных взаимодействий и эффективного дипольного момента)

колебательно-вращательных полос молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$ для определения соответствующих параметров «материнской» молекулы этилена (а также прочих изотопических модификаций), и наоборот.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

получена новая высокоточная экспериментальная информация о 14 возбуждённых колебательных состояниях молекулы $\text{CH}_2=\text{CD}_2$, в общей сложности содержащих около 17000 колебательно-вращательных переходов. Эта информация может быть использована для пополнения спектроскопических банков данных, таких как HITRAN, GEISA, информационная система Института оптики атмосферы СО РАН «Спектроскопия атмосферных газов»;

разработаны практические примеры расчётов параметров эффективных операторов и спектров многоатомных молекул типа асимметричного волчка для курсов «Физика атомов и молекул», «Современные проблемы молекулярной спектроскопии» и аналогичных им;

представлены методические рекомендации для расчета параметров резонансных взаимодействий по известным из эксперимента высокоточным значениям параметров различных типов расщеплений.

Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования. Полученные результаты и разработанные методы и подходы могут найти применение в учреждениях, в которых ведутся исследования по теоретическим основам молекулярной спектроскопии, современным проблемам физики молекул, таких, как Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Институт спектроскопии РАН (г. Москва), Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики РАН (г. Нижний Новгород), Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН (г. Томск), Национальный исследовательский Томский политехнический университет; в учебном процессе Национального исследовательского Томского государственного университета и Национального исследовательского Томского политехнического университета при чтении курсов лекций «Физика атомов и молекул», «Современные проблемы молекулярной спектроскопии».

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

достоверность обосновывается корректностью постановки задач, использованием апробированных теоретических методов решения и физически обоснованными приближениями;

использованы современные программные среды для разработки алгоритмов и создания программ на языках MAPLE, FORTRAN;

приведено сравнение полученных значений спектроскопических параметров возбуждённых колебательных состояний со значениями параметров основного колебательного состояния, разница между которыми составляет 5–10 %, что соответствует положениям и выводам теории колебательно-вращательной спектроскопии молекул;

выявлено согласие полученных значений параметров, значений колебательно-вращательных энергий с аналогичными результатами других авторов (Хироты, Хегеланда, Данкана) в том случае, когда было возможно сравнение.

Научная новизна результатов исследования заключается в том, что:

получен массив новых экспериментальных данных на современном оборудовании (спектрометры BRUKER IFS 120HR и IFS 125HR);

впервые определены энергетические уровни ряда возбуждённых вращательных состояний (в том числе, запрещённых по симметрии полос ν_4 , $\nu_7+\nu_{10}$, $\nu_8+\nu_{10}$, слабых комбинационных полос $\nu_4+\nu_{10}$, $\nu_4+\nu_7$, обертона $2\nu_{10}$);

определены параметры эффективного гамильтониана для 14 состояний;

рассчитаны параметры эффективного дипольного момента, интенсивности линий и коэффициенты уширения;

впервые для описания спектральных линий исследуемой молекулы применён теоретический спектральный контур Хартманна–Тран и показана его эффективность для воспроизведения экспериментальных данных (интенсивностей и полуширин линий).

Личный вклад соискателя состоит в: участии в постановке цели и задач исследования, регистрации экспериментальных спектров и их интерпретации, расчёте параметров эффективного гамильтониана, исследовании интенсивностей

спектральных линий поглощения, определении параметров эффективного дипольного момента, а также в подготовке публикаций по выполненным работам.

Диссертация отвечает критериям, установленным Положением о присуждении учёных степеней для диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, и, в соответствии с пунктом 9 Положения, является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи регистрации, анализа спектров высокого разрешения молекулы $\text{CH}_2 = \text{CD}_2$ и построения модели для их описания с экспериментальной точностью, имеющей значение для развития колебательно-вращательной спектроскопии молекул.

На заседании 29.11.2018 диссертационный совет принял решение присудить **Берёзкину К. Б.** учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 22 человек, из них 6 докторов наук по специальности 01.04.05 – Оптика, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за – 21, против – 1, недействительных бюллетеней – нет.

Заместитель председателя
диссертационного совета

Войцеховский
Александр Васильевич

Учёный секретарь
диссертационного совета



Пойзнер
Борис Николаевич

29.11.2018