

ОТЗЫВ

официального оппонента о диссертации Конова Ивана Александровича «Теоретическое исследование спектров высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Диссертация Конова И. А. посвящена экспериментальному и теоретическому исследованию спектров молекул типа асимметричного волчка: метанола, ацетамида и этилена.

Актуальность избранной темы обусловлена тем, что эти вещества играют значительную роль в жизнедеятельности растений и для задач диагностики необходимо проводить расчеты спектров поглощения этих газов, что требует знания параметров спектральных линий. В настоящей работе методами современной теоретической молекулярной спектроскопии проведен расчет внутримолекулярных потенциальных функций многоатомных молекул, а также решение обратной задачи определения положений линий. Это потребовало разработки новых подходов, упрощающих реализацию извлечения более полной и точной информации из молекулярных спектров.

Научная значимость и практическая ценность. Методы и подходы, разработанные в данном диссертационном исследовании, представляют интерес для широкого круга специалистов, связанных со спектроскопией высокого разрешения. Следует отметить, что разработан новый метод построения гамильтониана для описания спектров высокого разрешения «нежестких» молекул на примере молекулы монодейтерированного метанола CH_2DOH ; получены в аналитическом виде выражения для компонентов обобщенного тензора инерции, которые зависят от угла внутреннего вращения асимметричного внутреннего волчка. Теоретическая модель была использована в качестве основы для создания пакета программ для решения прямых и обратных задач на языке аналитического программирования FORTRAN и MAPLE. Программы являются универсальными и применимы к «нежестким» молекулам с асимметричным внутренним волчком. Разработанные программы применялись для анализа спектров высокого разрешения молекул CH_2DOH и $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$.

Несомненна практическая значимость данного исследования. Получен набор спектроскопических параметров для молекулы CH_2DOH , который позволяет воспроизводить центры 76 крутильных подполос, из них 29 центров подполос

определены впервые, со среднеквадратичным отклонением на порядок выше, чем в предыдущих исследованиях. Получены новые данные о колебательно-вращательных спектрах молекулы $C_2H_2D_2$ -цис. Высокоточная информация о колебательно-вращательных переходах является существенным дополнением к банкам спектроскопической информации.

Достоверность полученных в диссертации теоретических результатов и рассчитанных спектральных характеристик исследуемых молекул не вызывает сомнений, поскольку все исследования, проводимые в диссертационной работе, основаны на общих положениях и принципах теоретической колебательно-вращательной спектроскопии. Расчеты проведены квалифицированно и грамотно. Это подтверждается тем, что некоторая часть полученных данных уточняет ранее известные результаты, и не противоречит им. Достоверность полученных результатов подтверждается также тем, что они прошли экспертизу в международных журналах с высоким импакт-фактором и неоднократно докладывались на российских и международных конференциях.

Новизна результатов диссертации также несомненна. Следует выделить предложенный автором новый подход в построении крутильно-вращательного гамильтониана для «нежестких» молекул, обладающих асимметричным внутренним волчком. На основе данного подхода при построении крутильно-вращательного гамильтониана были впервые определены положения 29 крутильных подполос и их вращательная структура для молекулы монодейтерированного метанола CH_2DOH в области $20-800\text{ см}^{-1}$. Также впервые проинтерпретировано более 170 переходов монодейтерированного ацетамида CH_2DCONH_2 в области $5,8-165\text{ ГГц}$, в результате чего впервые в качественном виде определен вид потенциальной функции внутреннего вращения молекулы CH_2DCONH_2 . Для «нормальной» молекулы $C_2H_2D_2$ -цис типа асимметричного волчка был улучшен набор спектроскопических параметров основного колебательного состояния, на основе которого проведен анализ и определены спектроскопические параметры системы четырех сильно взаимодействующих состояний молекулы $C_2H_2D_2$ -цис в спектральном диапазоне $1280-1400\text{ см}^{-1}$. В результате впервые для полосы $2\nu_{10}$ молекулы $C_2H_2D_2$ -цис были определены 22 запрещенных симметрией молекулы перехода.

Структура диссертации. Рецензируемая работа Конова И. А. является законченным научным исследованием, имеет каноническую структуру и состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы и приложений. Для изложения

диссертации потребовалось 195 страниц, включая 17 таблиц и 17 рисунков, а также библиография, состоящая из 110 наименований.

Во **введении** заявлен предмет исследования, обоснована актуальность плана работы, сформулированы цели и задачи работы, положения, выносимые на защиту, научная ценность, новизна и достоверность полученных результатов, изложена структура диссертации.

Первая глава диссертации посвящена описанию методов исследования многоатомных молекул типа асимметричного волчка. Подробно обсуждаются вопросы построения колебательно-вращательного и крутильно-вращательного гамильтонианов, основные положения теории изотопозамещения, операторной теории возмущений, неоднозначность определения эффективного гамильтониана, редукция. Данные сведения необходимы для изложения оригинальной части работы.

Во второй главе подробно описана процедура по разработке нового подхода построения гамильтониана для анализа спектров высокого разрешения молекул с асимметричным внутренним волчком и остовом. Приведены полученные в аналитическом виде компоненты обобщенного тензора инерции для молекулы монодейтерированного метанола, на основе которых были рассчитаны положения центров крутильных подполос. Описана процедура расчета относительных интенсивностей и следующая за ней интерпретация вращательной структуры крутильных подполос молекулы CH_2DOH . В результате определен набор параметров, который воспроизводит исходные экспериментальные данные со среднеквадратичным отклонением $0,09 \text{ см}^{-1}$. А также проведен анализ спектра высокого разрешения молекулы монодейтерированного ацетамида $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$. В результате впервые определены частоты вращательных переходов основного крутильного состояния e_0 и на этой основе получены параметры потенциальной функции внутреннего вращения молекулы $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$.

В третьей главе представлены результаты анализа Фурье-спектров молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис в диапазонах $580\text{-}1210 \text{ см}^{-1}$ и $1280\text{-}1400 \text{ см}^{-1}$. Теоретическая модель была выбрана с учетом резонансных взаимодействий, соответствующих рассматриваемой системе. Представлены наборы вращательных, центробежных и резонансных параметров различного порядка малости эффективного гамильтониана, полученные в ходе решения обратной спектроскопической задачи.

Общие итоги работы представлены в **заключении**. Они соответствуют заявленным целям и задачам исследования, характеризуют научную новизну и практическую значимость работы.

По содержанию и оформлению работы можно сделать следующие **замечания**:

1. В работе недостаточно использованы статистические методы обработки экспериментальных данных. Так, например, при обработке экспериментально измеренных спектров при определении некоторых спектроскопических параметров наблюдались расхождения с другими авторами, что отмечается в диссертации (см., например, стр.108). Далее, автор диссертации из интуитивных соображений вводит некоторые ограничения на ряд параметров. Привлечение дисперсионного анализа позволило бы более объективно сделать обоснованный вывод о статистической значимости вышеуказанных параметров, а также более качественно описать математическую и физическую модель объекта исследования. Частично вопросы выбора параметров модели обсуждаются на стр. 117 диссертации, где отмечается, что обратные спектроскопические задачи относятся к классу плохо обусловленных и одним из методов регуляризации является снижение размерности задачи. Однако детального обсуждения, какие параметры модели значимы, а какие нет, также не представлено.
2. Не очень удачно сформулировано последнее защищаемое положение. В первом положении речь идет о новой модели, которая обеспечивает снижение погрешности аппроксимации на порядок, а в третьем примерно о том же, но при условии учета соответствующих резонансов. Если при создании «новой модели» учитывались все резонансы, которые могли повлиять на расчет положений центров спектральных линий, то нужно было бы в третьем защищаемом положении указать на особую роль резонансов Ферми и Кориолиса именно в этой, разработанной автором новой модели.
3. Есть ряд замечаний, связанных с оформлением диссертации. Например, на стр.36 есть стилистическая ошибка «не сложной диагонализации» вместо «несложной диагонализации», а на стр. 105 используется термин «неточность» вместо «погрешность».

Сделанные замечания не снижают важности полученных результатов и общей положительной оценки диссертационной работы, которая представляет собой законченное научное исследование, свидетельствующее о высокой научной квалификации автора.

Основные результаты, представленные в диссертации, опубликованы в рецензируемых изданиях: отечественных журналах из списка ВАК (5 статей), и в зарубежных журналах с высоким импакт-фактором (3 статьи), а также представлены на 8 российских и зарубежных научных конференциях.

Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Заключение. Считаю, что в диссертации Конова Ивана Александровича «Теоретическое исследование спектров высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка» представлено решение актуальной научной задачи, она содержит новые результаты, имеющие существенное научное значение. Диссертация соответствует требованиям п.8 «Порядка присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете» (приказ № 93/од ректора от 06.12.2018). Диссертационная работа соответствует паспорту специальности 01.04.05 - Оптика, а ее автор - И.А. Конов заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 - Оптика.

Официальный оппонент,

Фирсов Константин Михайлович, доктор физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика, профессор, профессор кафедры «Радиофизика»

Фирсов Константин Михайлович

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный университет»,
400062, Россия, г. Волгоград, пр. Университетский, 100.
Тел.: (8442) 46-08-11
e-mail: fkm@volsu.ru

Подпись К.М. Фирсова заверяю
Ученый секретарь ВолГУ
11 февраля 2020 г.



И.В. Лисовская