

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. направлена на исследование спектров высокого разрешения метанола, ацетамида и этилена, анализ измеренных спектров, построение теоретических моделей, описывающих спектры с высокой точностью, извлечение из спектров информации о молекулярных характеристиках исследуемых молекул.

Актуальность исследования. Спектры высокого разрешения в инфракрасной и видимой области являются уникальным источником данных о свойствах и структуре молекул, внутримолекулярных взаимодействиях. Исследование спектров изотопических модификаций молекул, позволяет также получить дополнительную информацию о силовом поле, дипольном моменте и других молекулярных характеристиках. Информация о параметрах спектральных линий, получаемая при теоретическом анализе спектров, необходима для создания и пополнения банков спектроскопической информации. Поэтому тема диссертационной работы Конова И.А., решаемые задачи и полученные результаты, без сомнения, являются актуальными.

Содержание работы. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка используемой литературы и приложений. Структура и объем работы удовлетворяют установленным требованиям к кандидатской диссертации.

Во введении сформулированы цели и задачи работы, обоснована ее актуальность, положения, выносимые на защиту, новизна и достоверность полученных результатов, их научная ценность.

Первая глава диссертации носит обзорный характер, в ней приводится необходимый литературный обзор. Рассмотрены основные понятия, приближения и методы, используемые при изложении основной части работы. Представленная информация достаточно корректно описывает состояние достигнутого уровня теоретических исследований по теме диссертации.

Во второй главе предложен новый способ построения гамильтониана «нежестких» молекул, обладающих асимметричным внутренним волчком и асимметричным остовом. При подходящем выборе внутримолекулярной координатной

системы оказывается возможным представить гамильтониан в удобном для вычислений виде, при этом все компоненты обобщенного тензора инерции являются функциями внутреннего угла вращения. При построении эффективного гамильтониана были учтены различные виды резонансных взаимодействий внутреннего волчка и остова. Для интерпретации спектров применялись предварительные расчеты с использованием информации о геометрической структуре изотопических модификаций, обладающих симметричным внутренним волчком и рассчитанные относительные интенсивности.

В результате проведенного исследования определен набор параметров, позволяющий воспроизвести измеренные данные со средней точностью 0.09 см^{-1} , что на порядок превосходит результаты предыдущих исследований. Впервые определена вращательная структура основного крутильного состояния e_0 молекулы монодейтерированного ацетамида $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$, что в свою очередь, позволило впервые определить потенциальную функцию внутреннего вращения.

Третья глава посвящена изучению спектров высокого разрешения молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис. Определены вращательные и центробежные постоянные основного колебательного состояния, для этого использовались как ИК (полоса ν_{12}), так и микроволновые данные. Новые спектроскопические параметры основного состояния $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис применены для анализа спектров поглощения в диапазонах $580\text{--}1210 \text{ см}^{-1}$ и $1280\text{--}1400 \text{ см}^{-1}$. Поскольку в указанные спектральные диапазоны попадают переходы на колебательные состояния, сильно возмущенные различными резонансными взаимодействиями, то теоретическая модель учитывала все возможные резонансные возмущения. В результате выполнен анализ вращательной структуры полос ν_{12} , ν_3 , $2\nu_{10}$, $\nu_8 + \nu_{10}$, ν_6 и ν_4 . Получены вращательные, центробежные и резонансные параметры эффективного гамильтониана, описывающие экспериментальные спектры на уровне погрешности измерений.

Основные результаты работы, соответствующие поставленным задачам и целям исследования, приводятся в заключении.

Научная значимость и практическая ценность работы.

В диссертации Конова И.А., представлены результаты теоретического анализа Фурье – спектров высокого разрешения молекул CH_2DOH , $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$ и $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис. Полученные при этом новые данные представляют большой интерес для пополнения спектроскопических банков данных HITRAN и GEIASA, а также содержат высокоточную информацию о различных молекулярных характеристиках и внутримолекулярной динамике. Эти новые данные также необходимы для уточнения

ab initio расчётов по определению функции потенциальной энергии, структуры молекул и дипольных моментов исследуемых молекул. Разработанные автором теоретические модели, можно использовать для расширения извлекаемой из экспериментальных спектров информации о молекулах CH_2DOH , $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$ и $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис в различных спектральных диапазонах.

Достоверность полученных результатов и выводов основывается, прежде всего, на применении хорошо установленных вычислительных методов квантовой механики, и подтверждается хорошим согласием между экспериментальными данными и теоретическими расчетами.

Новизна результатов диссертации. Автором предложен новый подход в построении крутильно-вращательного гамильтониана для «нежестких» молекул, обладающих асимметричным внутренним волчком. Новый подход позволил определить спектроскопические постоянные, воспроизводящие эксперимент с точностью значительно лучшей, чем в предыдущих исследованиях. В диссертации получены спектроскопические параметры как для «нормальной» молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис, так и для «нежестких» молекул CH_2DOH , $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$, потенциально имеющих широкое применение в различных приложениях.

Публикации по теме диссертации. Результаты диссертационной работы Конова И.А. опубликованы в 8 статьях в научных изданиях, имеющих высокий рейтинг («Journal of Chemical Physics», «Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer», «Известия высших учебных заведений. Физика»), а также докладывались на Российских и Международных конференциях.

Личный вклад соискателя заключается в участии в постановке задачи, разработке нового подхода в построении гамильтониана для анализа спектров «нежестких» молекул, идентификации линий в спектре, решении обратных задач и обсуждении результатов.

Автореферат диссертации точно отражает ее содержание.

Недостатки работы и замечания. Тема диссертационной работы, полученные автором результаты и выводы не вызывают возражений. Однако в тексте имеется значительное число неточностей, неудачных выражений и ошибок.

1) Название работы «Теоретическое исследование спектров высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка» является слишком общим, более подходящим представляется «Теоретическое исследование спектров высокого разрешения молекул $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$, CH_2DOH , $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$ и $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис»

2) В работе используются разложения в ряды, например формулы (1.108), (1.113), (3.2) – (3.7) и т.д. Однако в диссертации нет обсуждения вопросов сходимости этих рядов, указания области применимости используемых разложений.

3) В тексте имеется довольно большое число неудачных выражений. Например, на стр. 20, « $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – полностью антисимметричный тензор». В данном определении пропущена основная характеристика тензора – «единичный». Стр. 26, «Решить полученные аппроксимированные и разделенные уравнения Шрёдингера». Трудно понять, что означают аппроксимированные уравнения. Здесь же, «...где V определяется выражением (1.5)». Формула (1.5) не имеет отношения к потенциальной функции V , она определяет преобразование координат. Далее, стр. 30, «Некоторый оператор H , который является эрмитовым оператору H' ». Эрмитовость определяется безотносительно к какому – либо оператору. Стр. 43, в формуле (1.69) не определен оператор J_{xy}^2 , не определен антикоммутатор. Стр. 63, «содержит только вклады с квантовыми числами J_a, J_z ». На самом деле это операторы углового момента. Стр. 72, «Таблица 2.2. Значения структурных параметров, рассчитанных для молекулы CH_3OH , в а.е.м.». Эти параметры являются моментами инерции и имеют другую размерность. Стр. 102. «...непокрытых линий». По-видимому, имеется в виду «изолированные линии».

Заключение. Отмеченные недостатки работы не препятствуют ее положительной оценке. Диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне и содержит новые результаты, необходимые для различных приложений.

Считаю, что в диссертационной работе 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», утвержденного приказом ФГАОУ ВО НИ ТПУ от 06 декабря 2018г. № 93/од в редакции приказа от 28 августа 2019г. №66. Автор диссертационной работы Конов Иван Александрович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 - оптика.

Официальный оппонент,

Быков Александр Дмитриевич, доктор физико-математических наук
по специальности 01.04.05 – оптика, профессор по специальности «оптика»,
главный научный сотрудник.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт оптики атмосферы им. Е.В. Зуева Сибирского отделения
Российской академии наук

Быков Александр Дмитриевич

634055, Россия, Томск, площадь Академика Зуева, 1.

Тел. (3822) 49-27-38, Факс (3822) 49-20-85

e-mail adbykov@rambler.ru

Подпись А.Д. Быкова заверяю:

Ученый секретарь ИОА СО РАН,

к.ф.-м.н.

Тихомирова Ольга Владимировна

Дата «02 » марта 2020 г.

