

ОТЗЫВ

на автореферат 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.

В диссертации Конова И.А. поднимаются актуальные для современной молекулярной спектроскопии проблемы, в частности, вопросы интерпретации спектральных линий «нежестких» молекул с асимметричным внутренним волчком и остовом, которые, как правило, оказываются весьма сложными для решения. Другим важным моментом является исследование колебательно-вращательного спектра изотополога этилена, а именно, молекулы $C_2H_2D_2$ -цис. Данная молекула интересна тем, что, исследуя спектры изотополога, можно получить дополнительную информацию о «материнской» молекуле. Это связано с тем, что при изотопозамещении $C_2H_2D_2$ -цис $\leftarrow C_2H_4$ симметрия молекулы понижается, и в спектре проявляются полосы неактивные в ИК диапазоне для основной модификации. Исследование спектров только «материнской» молекулы, недостаточно для полного определения всех параметров силового поля молекулы. В силу, как правило, более высокой симметрии «материнской» молекулы нет возможности получения информации о ряде состояний (и, как следствие, о параметрах), так как в спектрах поглощения переходы на эти состояния запрещены по симметрии. Для получения более детальной информации необходимо исследовать спектры различных изотопических производных более низкой симметрии. Таким образом, исследование спектров изотопологов молекул является хорошим дополнительным источником информации при определении внутренней динамики молекул.

В представленной работе применяются квантово-механические методы для определения вращательной структуры спектров многоатомных молекул, таких как $C_2H_2D_2$ -цис, CH_2DOH и CH_2DCONH_2 . Для реализации разработанных алгоритмов были использованы языки программирования FORTRAN и MAPLE, а также процедуры и методы численного решения квантовых задач.

Автореферат верно отражает содержание диссертации. Многие из полученных результатов имеют приоритетное значение, их достоверность подтверждается строгостью математических моделей и согласованностью рассчитанных и экспериментальных результатов, а также хорошим согласием с полученными ранее данными. В случаях, когда имеют место расхождения расчетных и экспериментальных значений, представлен детальный анализ и приведены обоснованные выводы. Все результаты опубликованы в отечественной и мировой печати, прошли апробацию на международных конференциях и симпозиумах.

Считаю, что диссертационная работа «Теоретическое исследование спектров высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка» отвечает требованиям п.8 порядка присуждения учёных степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете, (Приказ № 93/од от 06.12.2018), а её автор Конов И.А., заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

Доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института оптики атмосферы им. Е.В. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук
Тел. (3822) 49-17-51, e-mail lnn@iao.ru

Лаврентьева Нина Николаевна

Подпись _____

Дата 13.03.2020

Сведения:

Полное наименование организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт оптики атмосферы им. Е.В. Зуева Сибирского отделения
Российской академии наук,
Россия, Томск, площадь Академика Зуева, 1.

Адрес места работы:

634055, Россия, Гомск, площадь Академика Зуева, 1,
Институт оптики атмосферы им. Е.В. Зуева Сибирского отделения
Российской академии наук

Даю согласие на обработку персональных данных _____

Подпись Лаврентьевой Нины Николаевны:

Ученый секретарь ИОА СО РАН,
к.ф.-м.н.

Тихомирова Ольга Владимировна

ДАТА «13» марта 2020 г.

