

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.

Диссертационная работа Конова И.А. представляет собой теоретическое исследование в области молекулярной спектроскопии и посвящена проблемам корректного извлечения высокоточной экспериментальной информации из спектров высокого разрешения монодейтерированных молекул типа асимметричного волчка, таких как этилен, метанол и ацетамид.

Спектроскопия высокого разрешения является одним из основных источников качественной и количественной информации о квантово-механических свойствах и строении молекул, а также динамических процессов внутри- и межмолекулярного характера. Информация о тонкой структуре спектров молекул, получаемая в результате анализа высокоточных экспериментальных спектров, позволяет определить фундаментальные характеристики молекул. В частности, высокоточные экспериментальные спектры содержат информацию о структурных постоянных, внутримолекулярном силовом поле, электрическом и магнитном дипольных моментах молекулы. Извлечение подобной информации имеет важную как научную, так и прикладную ценность при решении задач атмосферной оптики, газоанализа, при исследовании атмосфер планет, а также имеет множество других практических приложений. Таким образом, становится очевидной важность теоретического исследования спектров высокого разрешения многоатомных молекул.

К наиболее значимым результатам и выводам диссертационной работы относятся следующие: 1) предложен новый метод построения крутильно-вращательного гамильтониана для «нежестких» молекул, обладающих асимметричным внутренним волчком и остовом. Метод был применен для исследования спектров молекул метанола CH_2DOH и ацетамида $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$. При анализе спектров получен большой объем новых высокоточных данных о крутильно-вращательном энергетическом спектре исследуемых молекул;

2) проведено исследование высокоточных экспериментальных спектров молекулы этилена $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис, что позволило улучшить спектроскопические параметры основного состояния и получить спектроскопические параметры колебательных полос ν_{12} , ν_3 , $2\nu_{10}$, $\nu_8 + \nu_{10}$, ν_6 и ν_4 , локализованных в диапазонах $580\text{-}1210\text{ см}^{-1}$ и $1280\text{-}1400\text{ см}^{-1}$;

3) в результате проведенного анализа исследуемых в работе спектров высокого разрешения молекул метанола CH_2DOH , ацетамида $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$ и этилена $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис получены наборы спектроскопических параметров, которые позволяют воспроизводить их экспериментальные спектры с высокой точностью.

Основные материалы, представленные в диссертации, в довольно полном объеме отражают печатные работы автора (5 статей в изданиях, рекомендованных ВАК, 3 статьи в международных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus), а также доклады на российских и международных конференциях.

По диссертационной работе можно сделать следующие замечания:

1. При формулировке поставленных задач диссертации упоминается следующее: «Определить относительные интенсивности линий, соответствующих переходам $K' \nu_i' \leftarrow K'' \nu_i''$, для молекулы CH_2DOH в диапазоне $0-900 \text{ см}^{-1}$;» и «Применить разработанный подход построения гамильтониана для определения параметров потенциальной функции внутреннего вращения монодейтерированного ацетамида $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$;». Однако в дальнейшем, ни в тексте автореферата, ни в выводах и результатах работы вопросы определения относительных интенсивностей линий и определения параметров потенциальной функции молекулы никак не затрагиваются.
2. При изложении второй главы диссертации, посвященной разработке нового подхода в построении гамильтониана для «нежестких» молекул с внутренним вращением (стр. 9), описывается молекулярно-фиксированная система координат исследуемой молекулы. На мой взгляд, было бы нагляднее показать это на рисунке, тем более что объем автореферата это позволяет.
3. При описании метода интерпретации спектров молекул, обладающих внутренним вращением, упоминается, что такую сложную задачу нельзя решить методом комбинационных разностей, поэтому интерпретация линий экспериментального спектра проводилась сравнением «синтетического, рассчитанного при использовании только одного основного параметра дипольного момента в диапазоне $0-900 \text{ см}^{-1}$ и экспериментального спектра». Совершенно не понятно, почему невозможно применение метода комбинационных разностей, который используется для определения вращательной структуры спектров, этот вопрос никак не обсуждается. И второе, как можно рассчитать синтетический спектр на основе лишь одного параметра дипольного момента? И речь явно идет о вращательной структуре, что подтверждает следующее предложение в автореферате о полученных результатах (стр.11).

Несмотря на отмеченные замечания, диссертационная работа И.А. Конова имеет достаточно завершённый характер, начиная от общих методов исследования до результатов количественных расчетов спектров конкретных молекул. В подавляющем большинстве полученные автором диссертации результаты являются новыми, имеют научную и практическую значимость.

Считаю, что диссертационная работа Конова Ивана Александровича выполнена на высоком научном уровне, удовлетворяет всем необходимым требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям (п. 8 Порядка присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете), а её автор – И.А. Конов заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 - Оптика.

Профессор кафедры прикладной математики
Общеобразовательного факультета ФГБОУ ВО ТГАСУ,
доктор физико-математических наук, с.н.с

Г.А. Онопенко

Подпись _____
«16» марта 2020 г.

Подпись Онопенко Г.А. заверяю
Ученый секретарь ФГБОУ ВО ТГАСУ
кандидат технических наук, доцент

Ю.А. Какушкин

Подпись _____
«16» марта 2020 г.



Сведения:

Полное наименование организации:

Федеральное государственное образовательное учреждение высшего образования
«Томский государственный архитектурно-строительный университет»,

Юридический адрес:

6340003, г. Томск, пл. Соляная, 2

Телефон: 8 (3822) 65-93-58

Эл.адрес: galex_on@mail.ru

Должность: профессор кафедры прикладной математики, д. ф.-м. н.

Ф.И.О.: Онопенко Галина Александровна

Даю согласие на обработку персональных данных _____