

ОТЗЫВ

дополнительного члена диссертационного совета ДС.ТПУ.02 на диссертацию **Конова Ивана Александровича** «Теоретическое исследование спектров высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Актуальность темы диссертационной работы.

Молекулярная спектроскопия представляет собой уникальный инструмент для изучения структуры молекул и решения, связанных с этим задач, таких как идентификация неизвестных веществ, выяснение их структурных особенностей, изучение межмолекулярных взаимодействий, а также количественный и качественный анализ веществ.

Диссертационная работа соискателя посвящена актуальной теме молекулярной спектроскопии, связанной с разработкой методов извлечения высокоточной информации о фундаментальных характеристиках молекул: их строении, внутримолекулярных силах, динамике колебаний и вращений. Поставленные задачи, в рамках выбранной темы, не относятся к тривиальным, поскольку процедура интерпретации спектров высокого разрешения оказывается затруднительной, ввиду особенностей, связанных с типом симметрии молекул, наличием различного вида резонансов, внутренним вращением, а также низкой интенсивностью регистрируемых спектров. Поскольку структура спектров молекулы напрямую зависит от ее геометрической конфигурации и особенностей колебательного движения атомов, методы и процедура исследования молекулярных спектров высокого разрешения имеют свои особенности, а построение корректных математических моделей, позволяющих описывать внутримолекулярные эффекты, представляет собой большой интерес.

В настоящей работе предложены новые пути решения вышеперечисленных задач, что свидетельствует об актуальности и важности выполненных исследований.

Содержание работы.

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы и приложений.

В первой главе диссертации приводится достаточно полный обзор теоретических методов исследования многоатомных молекул, достаточный для понимания оригинальной части работы.

Во второй главе содержится описание построения крутильно-вращательного гамильтониана, предложенного для анализа спектров высокого разрешения «нежесткой» молекулы монодейтерированного метанола, основанного на особенностях задания системы координат и учёта различных видов взаимодействия внутреннего волчка и остова исследуемой молекулы CH_2DOH . Представлены, также, компоненты обобщенного тензора инерции, полученные в аналитическом виде. Подробно описана процедура интерпретации вращательной структуры крутильных подполос молекулы CH_2DOH . В результате решения обратной спектроскопической задачи определен набор параметров, который воспроизводит исходные экспериментальные данные со среднеквадратичным отклонением $0,09 \text{ см}^{-1}$. В дальнейшем предложенный подход использовался для анализа спектра высокого разрешения молекулы монодейтерированного ацетамида $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$. В результате впервые определены частоты вращательных переходов основного крутильного состояния и параметры потенциальной функции внутреннего вращения молекулы $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$.

Третья глава диссертации содержит результаты анализа спектров высокого разрешения 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. Идентификация линий проведена на основе метода комбинационных разностей. Представлены наборы вращательных, центробежных и резонансных параметров различного порядка малости эффективного гамильтониана, полученные в ходе решения обратной спектроскопической задачи.

В заключении приводятся основные результаты и выводы по работе.

Оценивая диссертационную работу Конова И.А., считаю необходимым отметить следующее.

1) Научная значимость и практическая ценность.

Во-первых, в диссертации построен гамильтониан для «нежесткой» молекулы метанола CH_2DOH , обладающей асимметричным внутренним волчком. Данный подход универсален и был использован для исследования спектров высокого разрешения как молекулы метанола CH_2DOH , так и молекулы ацетамида $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$. При анализе спектров получен большой объем новых высокоточных данных о крутильно-вращательном энергетическом спектре исследуемых молекул. Эти данные могут быть использованы для решения широкого круга задач, например, теоретических расчетов спектров исследуемых молекул, вычисления спектроскопических параметров потенциальных функций внутреннего вращения и многое другое.

Во-вторых, в работе, были представлены результаты анализа спектров высокого разрешения молекулы типа асимметричного волчка $C_2H_2D_2$ -цис. Используя экспериментальные данные, полученные из анализа спектра полосы ν_{12} , были улучшены параметры основного состояния. Это позволило значительно увеличить информацию о вращательной структуре колебательных полос ν_{12} , ν_6 , а также следует отметить, что для полосы $2\nu_{10}$ молекулы $C_2H_2D_2$ -цис были впервые определены 22 запрещенных симметрией молекулы перехода.

В-третьих, в диссертации представлены теоретические модели, основанные на методе эффективных гамильтонианов. Полученные наборы спектроскопических параметров позволяют воспроизводить экспериментальные спектры с высокой точностью.

В-четвертых, на основе результатов анализа спектров молекулы ацетамида CH_2DCONH_2 был впервые определен вид её потенциальной функции внутреннего вращения.

2) Степень обоснованности и достоверности заключений, научных положений, выводов и рекомендаций.

Достоверность теоретических подходов обусловлена использованием квантово-механических моделей, общих положений и принципов теоретической колебательно-вращательной спектроскопии, а также минимальным числом упрощений, необходимых для воспроизведения экспериментальных данных. Достоверность полученных результатов подтверждается точным комбинационным правилом, и тем фактом, что полученные новые результаты не противоречат, а уточняют ранее известные данные. Положения, выносимые на защиту, обоснованы в выводах диссертационной работы.

Результаты исследований, представленных в диссертации, опубликованы в 16 работах из них 5 статей в журналах из списка ВАК, 3 статьи в зарубежных журналах с высоким импакт-фактором, а также 8 трудов, представленных на российских и зарубежных научных конференциях и коллоквиумах.

3) Научная новизна

результатов заключается в том, что автор предложил новый подход в построении крутильно-вращательного гамильтониана для «нежестких» молекул, обладающих асимметричным внутренним волчком. И в ряде спектральных диапазонов определены спектроскопические параметры молекул $C_2H_2D_2$ -цис, CH_2DON и CH_2DCONH_2 .

4) Соответствие диссертации и автореферата паспорту специальности.

Материалы диссертации и автореферата соответствуют пунктам 3, 4 и 5 паспорта научной специальности 01.04.05 - Оптика.

Замечания по диссертации.

1. Одна из задач, планируемых для решения в работе, сформулирована следующим образом: «Разработать новый метод построения гамильтониана для описания спектров высокого разрешения...», а в заключении утверждается, что ... «Предложен новый метод построения гамильтониана...». Однако в тексте диссертации и автореферата отсутствует отчетливая формулировка «новизны» предложенного метода. Возникает вопрос, насколько успешно удалось решить эту задачу?
2. Утверждение (стр. 120 диссертации, стр. 14 автореферата), что «Улучшены спектроскопические параметры основного состояния молекулы $C_2H_2D_2...$ » не представляется корректным, так как вычислительные манипуляции вряд ли в состоянии повлиять на параметры молекулы.
3. В тексте диссертации и автореферата имеется ряд стилистических погрешностей: Например, «Большая часть эксперимента была проведена при использовании ячейки длиной 3 метра как при комнатной температуре, 296 К,...(Стр. 67 диссертации, строка 8 снизу); «На первом этапе исследования была проделана интерпретация переходов...» Стр. 11 автореферата диссертации (строка 2 снизу)

Однако, указанные замечания не влияют на высокий уровень работы и несут существенны для положительной оценки работы, которую можно считать выполненной на высоком теоретическом, экспериментальном и профессиональном уровне.

Автореферат диссертации отражает в полной мере содержание диссертации и дает представление о полноте и глубине проведенных научных изысканий диссертанта.

Благодаря системному подходу, полученные Коновым И.А. результаты имеют высокую научную и практическую ценность. Работа диссертанта является законченным научным исследованием.

Считаю, что диссертационная работа Конова Ивана Александровича «Теоретическое исследование спектров высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка» полностью соответствует требованиям п.8 «Порядка присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете», утвержденного приказом ФГАОУ ВО НИ ТПУ от

06.12.2018г. № 93/од в редакции приказа от 28 августа 2019 г. № 66, а ее автор - И.А. Конов заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 - Оптика.

Дополнительный член диссертационного
совета ДС.ТПУ.02
профессор ИШФВП ФГАОУ ВО
«Национальный исследовательский
Томский политехнический университет»,
доктор физико-математических наук

Пичугин
Владимир Фёдорович

Подпись 
Дата 12.03.2020г.

Подпись Пичугина В. Ф. заверяю:
учёный секретарь Учёного совета ТПУ



О. А. Ананьева

Сведения:

Полное наименование организации:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

Юридический адрес: г. Томск, проспект Ленина, дом 30.

Телефон: 8 (3822) 60-61-64

Эл. адрес: pichugin@tpu.ru

Должность: профессор ИШФВП

Ф.И.О. Пичугин Владимир Фёдорович

Даю согласие на обработку персональных данных  В.Ф. Пичугин