

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 избранной темы обусловлена тем, что современная теоретическая молекулярная спектроскопия нуждается во все более точной информации о фундаментальных спектроскопических параметрах многоатомных молекул, используемой в задачах таких областей науки как астрофизика, изучение атмосферы планет, физическая химия и др. Расчет внутримолекулярных потенциальных функций многоатомных молекул, а также решение обратных спектроскопических задач по определению положений линий являются важными задачами, решаемыми методами молекулярной спектроскопии. В такой ситуации необходимым является разработка подходов, упрощающих реализацию извлечения все более полной и точной экспериментальной информации из молекулярных спектров. В настоящей работе предложены новые пути решения озвученных выше задач, что говорит об актуальности и важности выполненных исследований.

Общая характеристика работы

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы и приложений. Общий объем диссертации составляет 195 страниц, включая 17 таблиц и 17 рисунков, а также библиографические источники информации из 110 наименований.

Целью диссертационной работы является экспериментальное и теоретическое исследование спектров молекул типа асимметричного волчка на примере метанола, ацетамида и этилена.

Анализ содержания работы

Во введении описана актуальность выбранной темы, обозначены цели и задачи проводимых исследований, заявлен предмет исследования, сформулированы выносимые на защиту научные положения, приводится научная ценность и новизна полученных результатов, достоверность, а также изложена структура диссертации.

Первая глава диссертации посвящена подробному описанию основных методов исследования многоатомных молекул как «нормальных», так и «структурно-нежестких». Подробно обсуждаются вопросы построения колебательно-вращательного и крутильно-вращательного гамильтонианов, основные положения теории изотопозамещения, операторной теории возмущений, неоднозначность определения эффективного гамильтониана, редукция.

Вторая глава посвящена описанию особенностей выбора системы координат в новом подходе построения крутильно-вращательного гамильтониана, разработанного для анализа спектров высокого разрешения молекул, обладающих асимметричным внутренним волчком и остовом. На этой основе были рассчитаны положения центров крутильных подполос молекулы монодейтерированного метанола CH_2DOH и проведена интерпретация их вращательной структуры. В результате решения обратной спектроскопической задачи определен набор параметров, представленный в таблице 2.6

который воспроизводит исходные экспериментальные данные со среднеквадратичным отклонением $0,09 \text{ см}^{-1}$.

Раздел 2.5 содержит информацию об анализе спектра высоко разрешения молекулы монодейтерированного ацетамида $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$, полученную на основе предложенного нового метода, для анализа спектров «структурно нежестких» молекул. В результате впервые определены частоты вращательных переходов основного крутильного состояния e_0 и на этой основе получены параметры потенциальной функции внутреннего вращения молекулы $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$. Вид потенциальной функции внутреннего вращения в зависимости от угла внутреннего вращения представлен на рисунке 2.5.

В третьей главе представлены результаты исследования Фурье-спектров молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис в диапазонах $580\text{-}1210 \text{ см}^{-1}$ и $1280\text{-}1400 \text{ см}^{-1}$. В рамках рассмотренного метода эффективных гамильтонианов решается обратная задача для определения параметров четырех сильно взаимодействующих колебательных состояний на основе их энергетической структуры. Для получения корректного набора спектроскопических параметров часть из них была фиксирована теоретически рассчитанными значениями. Сложная резонансная структура проиллюстрирована на рисунке 3.8. Высокий уровень воспроизведения исходных данных подтверждается значениями среднеквадратичного отклонения, которые лежат в пределах экспериментальной погрешности.

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

Научная значимость и практическая ценность не вызывает сомнения. В диссертационной работе был разработан новый подход к построению гамильтониана для «нежестких молекул», который использовался для исследования спектров высокого разрешения такого рода молекул, а именно, CH_2DOH и $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$. Автором были созданы пакеты программ на языках аналитического программирования FORTRAN и MAPLE, в основе которых заложена разработанная теоретическая модель. Данные программы являются универсальными для «нежестких» молекул типа $\text{-XY}_2\text{Z}$, обладающих ассиметричным волчком и остовом. Используя данное программное обеспечение был проведен анализ спектров высокого разрешения молекул CH_2DOH и $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$. В первом случае, при решении обратной спектроскопической задачи был определен набор спектроскопических параметров, который позволяет воспроизвести центры 76 крутильных подполос со среднеквадратичным отклонением на порядок выше, чем в предыдущих исследованиях. Во втором случае, были впервые определены частоты вращательных переходов основного крутильного состояния e_0 для молекулы $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$ и параметры её потенциальной функции внутреннего вращения. А также было проведено исследование спектров высокого разрешения молекулы $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис, что позволило получить новую информацию о колебательно-вращательной структуре спектров и улучшить уже имеющиеся данные в литературе.

Научная новизна результатов, полученных в диссертационном исследовании, заключается в разработке нового подхода построения гамильтониана для «нежестких» молекул, обладающих ассиметричным волчком и остовом. Используя данный теоретический метод исследования, автору удалось получить новую информацию из спектров высокого разрешения молекулы CH_2DOH , а именно, были определены

впервые 29 центров крутильных подполос в области 20-800 см⁻¹. Для молекулы CH₂DCONH₂ в области 5,8-165 ГГц впервые было проинтерпретировано более 170 вращательных переходов для крутильного колебания e₀. На основе полученных частот была определена потенциальная функция внутреннего вращения монодейтерированного ацетамида. Для молекулы C₂H₂D₂-цис, относящейся к классу «нормальных» молекул, был переопределен набор спектроскопических параметров гамильтониана, описывающий основное состояние молекулы, что позволило провести высокоточное исследование спектра молекулы в диапазоне 1280-1400 см⁻¹ и впервые определить 22 запрещенных по симметрии энергетических перехода для полосы 2ν₁₀. Как следствие был получен набор спектроскопических параметров, описывающий состояние (ν₁₀=2). А также были уточнены параметры для колебательных состояний (ν₁₂=1), (ν₆=1) и (ν₄=1) молекулы C₂H₂D₂-цис.

Степень обоснованности и достоверности научных положений, выводов и заключений.

Достоверность полученных в диссертации теоретических результатов и рассчитанных спектральных характеристик исследуемых молекул не вызывает сомнений, поскольку все исследования, проводимые в диссертации, основаны на общих положениях и принципах теоретической молекулярной спектроскопии. Расчеты проведены квалифицированно и грамотно. Это подтверждается тем, что в частных случаях, полученные Коновым И.А. результаты совпадают с более ранними результатами других авторов. Достоверность полученных результатов подтверждается еще тем, что они прошли экспертизу в международных журналах с высоким импакт-фактором и неоднократно докладывались на российских и международных конференциях.

Положения, выносимые на защиту, обоснованы в выводах по разделам диссертационной работы.

Соответствие диссертации и автореферата паспорту специальности.

Тема и содержание диссертации соответствуют областям исследования, указанным в паспорте специальности 01.04.05 - Оптика.

Публикации и апробация результатов работы.

Материал диссертационной работы достаточно полно изложен в публикациях (5 статей в журналах из списка ВАК, 3 статьи в зарубежных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus, а также 8 трудов как всероссийских, так и международных конференций и коллоквиумов). Работа составлено логично, основные результаты опубликованы.

Замечания по диссертации:

1. Во второй главе в разделе 2.3 приводится расчет относительных интенсивностей молекулы моно-дейтерированного метанола. Было бы разумно проиллюстрировать на рисунках работоспособность полученных расчетов. Привести сопоставления экспериментального спектра с «симулированным».
2. Была проделана работа по улучшению основного состояния (более 400 комбинационных разностей), но сами разности не приводятся. Проверяться ли работоспособность полученных параметров основного состояния на других полосах? Если, да, то каких? Можно ли использовать полученные параметры при анализе полос с симметрией отличной от симметрии полос ν₁₂ и ν₆?

Заключение.

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.

Новые научные результаты, полученные Коновым И.А. лично, либо с непосредственным участием, имеют существенное значение для международных и российских исследований, проводимых в области молекулярной спектроскопии. Работа отвечает требованиям п. 8 Порядка присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете (Приказ №93/од от 06.12.2018), предъявляемым к кандидатским диссертациям с точки зрения актуальности, новизны и практической значимости полученных результатов, 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

Громова
Ольга Васильевна

«Национальный исследовательский Томский
политехнический университет», PhD

Подпись _____
Дата 05.03.2020

Подпись Громовой О.В. заверяю:
ученый секретарь Ученого 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: olgerda@tpu.ru

Должность: профессор ИШФВП

Ф.И.О. Громова Ольга Васильевна

Даю согласие на обработку персональных данных _____