

## УТВЕРЖДАЮ:

И. о. проректора по научной и инновационной деятельности Национального исследовательского Томского государственного университета, кандидат геолого-минералогических наук

  
Краснова Гатьяна Семеновна  
« 24 » октября 2019 г.



## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования  
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»

Диссертация «Теоретическое исследование спектров высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка» выполнена на кафедре теоретической физики.

В период подготовки диссертации соискатель Конов Иван Александрович работал в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», на кафедре оптики и спектроскопии, в должности старшего преподавателя; с 01 октября 2012 г. по 30 сентября 2015 г. очно обучался в аспирантуре федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

В 2012 г. окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» по направлению «Физика».

Справка об обучении (о периоде обучения) и о сдаче кандидатских экзаменов при прохождении промежуточной аттестации выдана в 2019 г. федеральным государственным автономным образовательным учреждением высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Научный руководитель – Уленков Олег Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, основное место работы: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Исследовательская школа физики высокоэнергетических процессов, профессор (на момент назначения научным руководителем – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», кафедра оптики и спектроскопии, профессор).

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

### **Оценка выполненной соискателем работы**

Диссертация И. А. Конова является законченной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи исследования фундаментальных свойств веществ методами спектроскопии высокого разрешения, имеющей значение для развития оптики в части теоретической колебательно-вращательной спектроскопии молекул.

### **Актуальность темы и направленность исследования**

Структура спектров молекулы напрямую зависит от ее геометрической конфигурации и особенностей колебательных движений атомов. Например, спектры «нормальных» молекул, относящихся к классу асимметричного волчка (так называемые молекулы с «нормальными» колебаниями), имеют, с качественной точки зрения, различную структуру со спектрами «нежестких» молекул класса асимметричного волчка, обладающих внутренним вращением. Как следствие, методы и подходы исследования спектров высокого разрешения молекул, относящихся к той или иной группе, имеют свои, требующие детального рассмотрения, особенности. Структурно-нежесткие молекулы, как и «нормальные» молекулы представляют большой интерес в контексте построения корректной математической модели, позволяющей описывать внутримолекулярные эффекты. Задача интерпретации спектральных линий «нежестких» молекул часто оказывается весьма сложной. Следует заметить, что большое внимание исследователей уделено молекулам с симметричным внутренним волчком, в то время как для молекул с асимметричным внутренним волчком предложенные методики не позволяют получать удовлетворительных результатов.

Следует также отметить, что при определении фундаментальных свойств молекул особую роль играют исследования спектров высокого разрешения изотопически замещенных молекул. Исследования спектров только «материнской» молекулы, например метанола или этилена, 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) по причине того, что 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 при определении внутренней динамики молекул.

Все указанные выше сложности и практическая значимость информации, получаемой из анализа колебательно-вращательной структуры спектров для различных задач астрофизики, физической химии, атмосферной оптики, газоанализа и многих других отраслей наук, определяют актуальность исследования, проводимого в рамках настоящей работы.

Диссертационная работа выполнена в соответствии с направлением научных исследований кафедры теоретической физики Национального исследовательского Томского государственного университета.

### **Утверждение темы диссертации, назначение научного руководителя**

Тема утверждена решением ученого совета физического факультета Томского государственного университета от 21 ноября 2012 г., протокол № 424; изменена решением ученого совета физического факультета от 11 июня 2015 г., протокол № 447.

Научным руководителем назначен доктор физико-математических наук, профессор О. Н. Уленков (приказ по Томскому государственному университету от 25 сентября 2012 г. № 2945/с).

### **Личное участие автора в получении результатов, изложенных в диссертации**

Постановка цели и задач осуществлялась совместно с научным руководителем. Подавляющее большинство результатов, вошедших в диссертацию, получены лично автором как в индивидуальных, так и в коллективных исследованиях. Вклад автора на разных этапах выражался в участии при постановке решаемых задач; самостоятельной разработке путей и методов их решения, разработке алгоритма и создании программы расчета на языках FORTRAN и MAPLE, проведении непосредственных расчетов, обсуждении и интерпретации полученных в ходе выполнения работы результатов.

### **Степень достоверности результатов проведенного исследования**

Достоверность результатов диссертационного исследования обеспечивается строгостью используемых моделей и математических методов, соответствием результатов теоретических исследований экспериментальным данным как ранее известным в литературе по исследуемой теме, так и полученным впервые в рамках проводимого исследования, а также согласованностью полученных результатов с известными в литературе результатами численных расчетов там, где это возможно.

### **Новизна результатов проведенного исследования**

Научная новизна результатов, изложенных в диссертации, обусловлена тем, что в диссертационной работе:

- предложен новый подход в построении крутильно-вращательного гамильтониана для «нежестких» молекул, обладающих асимметричным внутренним волчком, заключающийся в использовании модифицированного задания молекулярно-фиксированной системы координат и выборе направления осей вдоль главных осей инерции молекулы;

- в результате анализа впервые было проинтерпретировано более чем 900 вращательных переходов с максимальными значениями квантовых чисел  $J^{\text{макс.}} = 29$ ,  $K_a^{\text{макс.}} = 11$  и  $K_c^{\text{макс.}} = 27$  для молекулы монодейтерированного метанола  $\text{CH}_2\text{DOH}$  в области  $20\text{-}800\text{ см}^{-1}$ ;

- впервые определены положения 29 крутильных подполос молекулы монодейтерированного метанола  $\text{CH}_2\text{DOH}$  в области  $20\text{-}800\text{ см}^{-1}$ ;

- впервые было проинтерпретировано более 170 переходов крутильного состояния  $e_0$  монодейтерированного ацетамида  $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$  в области  $5,8\text{-}156\text{ ГГц}$ ;

– впервые в качественном виде определен вид потенциальной функции внутреннего вращения монодейтерированного ацетамида  $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$  и численно оценены параметры затормаживающего потенциала;

– получены параметры основного колебательного состояния молекулы  $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис, позволяющие воспроизводить экспериментальные комбинационные разности с точностью, практически в пять раз выше, чем данные, известные в литературе;

– впервые исследована система четырех сильно взаимодействующих состояний молекулы  $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис в спектральном диапазоне  $1280\text{-}1400\text{ см}^{-1}$ ;

– впервые для полосы  $2\nu_{10}$  молекулы  $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис были определены 22 запрещенных симметрией молекулы перехода.

### **Теоретическая и практическая значимость диссертации и использование полученных результатов**

Теоретическая значимость полученных результатов заключается в том, что в диссертации разработан и практически реализован метод построения крутильно-вращательного гамильтониана для «нежестких» молекул, обладающих асимметричным волчком, а также определены параметры основного колебательного состояния, позволяющие с высокой точностью описывать равновесную вращательную структуру молекулы  $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис, основываясь только на экспериментальных данных.

Разработанный и апробированный пакет программ дает возможность как производить расчеты спектров высокого разрешения для различных «нежестких» молекул, обладающих асимметричным внутренним волчком типа  $\text{XYZ}_2$  ( $\text{C}_s$ ), так и выполнять интерпретацию спектров с последующим решением обратной спектроскопической задачи для молекул подобного рода.

Высокоточная спектроскопическая информация о положениях спектральных линий молекул  $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис,  $\text{CH}_2\text{DON}$  и  $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$  является важным дополнением к существующим базам данных колебательно-вращательных спектров молекул и может быть использована в качестве исходной информации для дальнейшего изучения этих молекул, а также для решения различных прикладных задач, в частности, при изучении атмосферы Земли и планет Солнечной системы.

Результаты исследования могут быть использованы в академических и производственных организациях, профилирующим направлением которых является спектроскопия высокого разрешения молекул, изучение проблемы мониторинга атмосферы, газоанализа, в частности в Институте оптики атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН (г. Томск), Институте прикладной физики РАН (г. Нижний Новгород), Институте спектроскопии РАН (г. Троицк Московской обл.).

### **Апробация результатов диссертации**

Материалы, вошедшие в диссертацию, докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях: 23-м Международном коллоквиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Будапешт, Венгрия, 2013), 24-ой Международной конференции по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Болонья, Италия, 2014), 69-м международном симпозиуме

по молекулярной спектроскопии (Шампейн–Урбана, Иллинойс, США, 2014), 18-й Международной симпозиуме-школе молодых ученых по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Томск, Россия, 2015), 24-м Международном коллоквиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Дижон, Франция, 2015), 24-й Международной конференции по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Прага, Чехия, 2016), 25-м Международном коллоквиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Хельсинки, Финляндия, 2017), 25-й Международной конференции по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Бильбао, Испания, 2018).

**Ценность научных работ соискателя, полнота изложения материалов диссертации в опубликованных работах**

По теме диссертации И. А. Коновым опубликовано 16 работ, в том числе 8 статей в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук (из них 3 статьи в зарубежных научных журналах, входящих в Web of Science, 5 статей в российском научном журнале, переводная версия которого входит в Web of Science), 8 публикаций в сборниках материалов международных конференций и симпозиумов (6 из них в сборниках материалов зарубежных конференций). Общий объем публикаций – 5,8 а.л., авторский вклад – 2,06 а.л. В опубликованных работах достаточно полно изложены материалы диссертации.

*Статьи в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук:*

1. El Hilali A. Analysis of the torsional spectrum of monodeuterated methanol  $\text{CH}_2\text{DOH}$  / A. El Hilali, L. H. Coudert, **I. Konov**, S. Klee // Journal of chemical physics – 2011. – Vol. 135, № 19. – P. 194309-(1–6). – DOI: 10.1063/1.3662468. – 0,48 / 0,45 а.л. (*Web of Science*).

2. Ulenikov O. N. High Resolution Analysis of the  $\text{SO}_2$  Spectra in the Region of  $2600\text{--}2900\text{ cm}^{-1}$  :  $2\nu_3$ ,  $\nu_2 + 2\nu_3 - \nu_2$ , and  $2\nu_1 + \nu_2$  Bands / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, I. B. Bolotova, **I. A. Konov**, V. M. Homeman, C. Leroy // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2012. – Vol. 113, № 7. – P. 500–517. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2012.01.006. – 1,06 / 0,5 а.л. (*Web of Science*).

3. **Конов И. А.** Анализ фурье-спектра высокого разрешения полосы  $\nu_6$  молекулы  $\text{cis-C}_2\text{H}_2\text{D}_2$  / И. А. Конов, Ю. В. Чертавских, А. Л. Фомченко, Ю. С. Аслаповская, С. А. Жданович, К. Зидо // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2015. – Т. 58, № 11. – С. 95–99. – 0,68 / 0,2 а.л.

*в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:*

**Konov I. A.** Analysis of the high-resolution fourier spectrum of the  $\nu_6$  band of the  $\text{cis-C}_2\text{H}_2\text{D}_2$  molecule / I. A. Konov, Yu. V. Chertavskikh, A. L. Fomchenko, Yu. S. Aslapovskaya, S. A. Zhdanovich, C. Sydow // Russian Physics Journal. – 2015. – Vol. 58, is. 11. – P. 1587–1591. – DOI 10.1007/s11182-016-0687-x.

4. Бехтерева Е. С. Эффект изотопозамещения в многоатомных молекулах на основе  $^{13}\text{C}_2\text{H}_4 \leftarrow ^{12}\text{C}_2\text{H}_4$  / Е. С. Бехтерева, О. В. Громова, К. Б. Берёзкин, Н. В. Каширина, **И. А. Конов**, З. Бауэрэкер // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2015. – Т. 58, № 11. – Р. 83–88. – 0,5 / 0,1 а.л.

*в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:*

Bekhtereva E. S. Isotope Substitution Effect in Polyatomic Molecules on the Example of  $^{13}\text{C}_2\text{H}_4 \leftarrow ^{12}\text{C}_2\text{H}_4$  Substitution / E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, K. B. Berezkin, N. V. Kashirina, **I. A. Konov**, S. Bauerecker // Russian Physics Journal. – 2016. – Vol. 58, is. 11. – P. 1573–1580. – DOI: 10.1007/s11182-016-0685-z.

5. Ulenikov O. N. Re-analysis of the High Resolution FTIR Spectrum of  $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -cis in the Region of 1280-1400  $\text{cm}^{-1}$  / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **I. A. Konov**, Yu. V. Chertavskikh, C. Maul, S. Bauerecker // Journal of quantitative spectroscopy & radiative transfer. – 2016. – Vol. 170. – P. 69–82. – DOI 10.1016/j.jqsrt.2015.10.011. – 1,04 / 0,4 а.л. (*Web of Science*).

6. Аслаповская Ю. С. Анализ основного колебательного состояния молекулы этилена-1- $^{13}\text{C}$  ( $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ ) / Ю. С. Аслаповская, О. В. Громова, К. Б. Берёзкин, **И. А. Конов**, К. Зидо // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2016. – Т. 60, № 2. – С. 68–73. – 0,79 / 0,09 а.л.

*в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:*

Aslapovskaya Yu. S. Analysis of the Ground Vibrational State of the Ethylene-1- $^{13}\text{C}$  ( $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ ) Molecule / Yu. S. Aslapovskaya, O. V. Gromova, K. B. Berezkin, **I. A. Konov**, K. Zido // Russian Physics Journal. – 2017. – Vol. 60, is. 2. – P. 273–278. – DOI: 10.1007/s11182-017-1071-1.

7. Зятыкова А. Г. Исследование спектра высокого разрешения полосы  $\nu_2$  диоксида серы / А. Г. Зятыкова, В. А. Замотаева, **И. А. Конов** // Оптика атмосферы и океанов. – 2018. – Т. 31, № 04. – С. 263–267. – 0,4 / 0,05 а.л.

*в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:*

Ziatkova A. G. Study of the High Resolution Spectrum of the  $\text{S}^{18}\text{O}^{16}\text{O}$  Molecule in the Hot  $2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$  Band (Article) / A. G. Ziatkova, O. V. Gromova, O. N. Ulenikov // Russian Physics Journal. – 2018. – Vol. 61, is. 1. – P. 36-40.

8. Конова Ю. В. Анализ колебательно-вращательного спектра высокого разрешения молекулы  $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -cis в диапазоне 1620–1780  $\text{cm}^{-1}$  / Ю. В. Конова, **И. А. Конов**, А. Г. Зятыкова // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2019. – Т. 62, №. 2. – С. 161–166. – 0,48 / 0,1 а.л.

*в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:*

Konova Yu. V. Analysis of the high-resolution rovibrational spectrum of the  $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -cis molecule in the region 1620–1780  $\text{cm}^{-1}$  / Yu. V. Konova, **I. A. Konov**, A. G. Ziatkova // Russian Physics Journal. – 2019. – Vol. 62, is. 2. – P. 363–369. – DOI 10.1007/s11182-019-01720-0.

*Публикации в прочих научных изданиях:*

9. Bekhtereva E. S. On the improvement of the Rotational Structure of the  $^{13}\text{CH}_3\text{D}$  Ground State / E. S. Bekhtereva, O. N. Ulenikov, Yu. V. Krivchikova, **I. A. Konov**, V.-M. Homerman // The Twenty-third Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy : Book of Abstracts. Budapest, Hungary, August 25–30, 2013. – Budapest, 2013. – P. 220. – DOI: 10.1080/00268976.2013.798437. – 0,04 / 0,02 а.л.

10. Ulenikov O. N. High resolution spectroscopic study of cis-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>D<sub>2</sub>: re-analysis of the ground state,  $\nu_{12}$ ,  $\nu_4 + \nu_7$ ,  $\nu_7 + \nu_8$  and  $\nu_2$  vibrational bands / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **I. A. Konov**, Yu. V. Chertavskikh, C. Maul, S. Bauerecker // The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. Bologna, Italy, September 02–06, 2014. – Bologna, 2014. – P. 243. – 0,05 / 0,03 а.л.

11. **Konov I. A.** The microwave spectrum of monodeuterated acetamide CH<sub>2</sub>DC(=O)NH<sub>2</sub> / I. A. Konov, L. H. Coudert, C. Gutle, T. R. Huet, L. Margules, R. A. Motiyenko, H. Mollendal, J.-C. Guillemin // 69th international symposium on molecular spectroscopy : Book of Abstracts. Champaign–Urbana, Illinois, USA, June 16–20, 2014. – Champaign–Urbana, 2014. – P. 249. – 0,05 / 0,04 а.л.

12. Chertavskikh Yu. V. High resolution analysis of the  $\nu_{12}$  band and re-analysis of the ground state of cis-d<sub>2</sub>-ethylene / Yu. V. Chertavskikh, **I. A. Konov**, A. S. Belova // XVIIIth Symposium and School on High Resolution Molecular Spectroscopy (HighRus–2015) : Abstracts of Reports. Tomsk, Russia, June 30–July 04, 2015. – Tomsk, 2015. – P. 116. – 0,04 / 0,02 а.л.

13. Ulenikov O. N. High resolution spectroscopic study of the C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>D<sub>2</sub>-cis spectra in the region of 580-1210 cm<sup>-1</sup>:  $\nu_4$ ,  $\nu_6$ ,  $\nu_7$ ,  $\nu_8$  and  $\nu_{10}$  vibrational bands / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, **I. A. Konov**, Yu. V. Chertavskikh, S. Bauerecker, C. Maul // The 24th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. Dijon, France, August 24–28, 2015. – Dijon, 2015. – P. 111. – 0,05 / 0,01 а.л.

14. **Konov I. A.** High resolution analysis of the  $\nu_4$ ,  $\nu_6$ ,  $\nu_7$ ,  $\nu_8$  and  $\nu_{10}$  vibrational bands of C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>D<sub>2</sub>-cis / I. A. Konov, Yu. V. Chertavskikh, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, O. N. Ulenikov, S. Bauerecker // 24th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy : Book of Abstracts. Prague, Czech Republic, August 30 – September 03, 2016. – Prague, 2016. – P. 170. – 0,05 / 0,02 а.л.

15. Konova Yu. V. Study of resonance interactions in the region of 1000-1500 cm<sup>-1</sup> in the C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>D<sub>2</sub>-cis molecule / Yu. V. Konova, **I. A. Konov**, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, S. Bauerecker, O. N. Ulenikov // The 25th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy : Book of Abstracts. Helsinki, Finland, August 20–25, 2017. – Helsinki, 2017. – P. 123. – 0,04 / 0,02 а.л.

16. Konova Yu. V. Analysis of resonance interactions in the bands located in the region of 1500-1750 cm<sup>-1</sup> in the C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>D<sub>2</sub>-cis molecule / Yu. V. Konova, **I. A. Konov**, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, S. Bauerecker, C. Sydow, O. N. Ulenikov // 25<sup>th</sup> International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy : Abstract Book, Bilbao, Spain, September 03–07, 2018. – Bilbao, 2018. – P. 265. – 0,05 / 0,01 а.л.

#### **Соответствие содержания диссертации избранной специальности**

Содержание диссертации соответствует специальности 01.04.05 – Оптика (физико-математические науки) по области исследования «Молекулярная оптика» (п. 3 паспорта специальности).

Диссертация «Теоретическое исследование спектров высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка» Конова Ивана Александровича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

Заключение принято на заседании кафедры теоретической физики физического факультета федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Присутствовало на заседании – 6 чел. Результаты голосования: «за» – 6 чел., «против» – нет, «воздержалось» – нет, протокол № 2 (1448) от 11 октября 2019 г.

*Шаповалов*

---

Шаповалов Александр Васильевич,  
доктор физико-математических наук,  
профессор, кафедра теоретической  
физики, заведующий кафедрой