

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА ДС.ТПУ.02,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
АВТОНОМНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ» МИНИСТЕРСТВА  
НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО  
ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА  
НАУК

решение диссертационного совета ДС.ТПУ.02 от 20.03.2020 г. № 6

О присуждении Конову Ивану Александровичу, гражданину РФ, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Теоретическое исследование спектров высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка»

по специальности 01.04.05 – Оптика

принята к защите 18.12.2019 (протокол заседания № 5) диссертационным советом ДС.ТПУ.02, созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования (ФГАОУ ВО) «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (НИ ТПУ), Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 634050, г. Томск, пр. Ленина 30, приказом по ФГАОУ ВО НИ ТПУ № 15895 от 06.12.2018 года.

Соискатель Конов Иван Александрович, 1988 года рождения.

В 2012 г. соискатель окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» по направлению подготовки «Физика» (квалификация «Магистр»).

В 2015 г. окончил очную аспирантуру федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Работает в должности старшего преподавателя на кафедре оптики и спектроскопии физического факультета ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Диссертация выполнена на кафедре теоретической физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения 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.

Дополнительно введенные члены диссертационного совета ДС.ТПУ.02:

**Громова Ольга Васильевна**, Ph.D., профессор Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»;

**Пичугин Владимир Фёдорович**, доктор физико-математических наук, профессор, профессор Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»;

Официальные оппоненты:

**Быков Александр Дмитриевич**, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории молекулярной спектроскопии федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт оптики атмосферы им. В. Е. Зуева» СО РАН, г. Томск;

**Фирсов Константин Михайлович**, доктор физико-математических наук, профессор кафедры радиофизики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Волгоградский государственный университет», г. Волгоград дали положительные отзывы на диссертацию.

Выбор официальных оппонентов и дополнительно введенных членов диссертационного совета обосновывается их высокой квалификацией в области молекулярной спектроскопии, широкой известностью своими достижениями в области физико-математических наук, наличием публикаций по выполненным исследованиям, близким к теме работы соискателя, опытом научно-исследовательской работы.

Соискатель имеет 16 опубликованных работ, все по теме диссертации, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 8 работ. Общий объем научных изданий составляет 5,8 печатных листов с долей авторского участия не менее 35%. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах.

Наиболее значимые научные работы:

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. **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.

3. Ulenikov O. N. Re-analysis of the High Resolution FTIR Spectrum of  $C_2H_2D_2$ -cis in the Region of 1280-1400  $cm^{-1}$  / 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).

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Отзыв на автореферат от к.ф.-м.н., Воронина Бориса Александровича, старшего научного сотрудника, лаборатории молекулярной спектроскопии ФГБУН Института оптики атмосферы им. Е.В. Зуева СО РАН. (с замечаниями);
2. Отзыв на автореферат от д.ф.-м.н., Онопенко Галины Александровны, профессора кафедры прикладной математики Общеобразовательного факультета ФГБОУ ВО Томского государственного архитектурно-строительного университета (с замечаниями);
3. Отзыв на автореферат от к.ф.-м.н., Третьякова Петра Юрьевича, заведующего кафедрой физики ФГБОУ ВО Тюменского индустриального университета (без замечаний);
4. Отзыв на автореферат от д.ф.-м.н., Черепанова Виктора Николаевича, доцента, заведующего кафедрой оптики и спектроскопии ФГАОУ ВО Национального исследовательского Томского государственного университета (без замечаний);
5. Отзыв на автореферат от д.ф.-м.н., Лаврентьевой Нины Николаевны, ведущего научного сотрудника, ФГБУН Института оптики атмосферы им. Е.В. Зуева СО РАН (без замечаний);
6. Отзыв на автореферат от д.ф.-м.н., Москаленко Николая Ивановича, профессора кафедры «Энергетическое машиностроение», ФГБОУ ВО Казанского государственного энергетического университета (без замечаний).

Все поступившие отзывы на автореферат положительные, замечания является рекомендательными, и касаются вопросов к используемым

формулировкам в тексте и программного обеспечения. Замечания не затрагивают существа работы и сделанных в диссертации выводов.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

**получен** торсионно-вращательный гамильтониан для структурно нежестких молекул, обладающих асимметричным внутренним волчком на основе нового метода выбора координат, позволяющий увеличить, получаемую из экспериментальных спектров высокого разрешения информацию, а учет параметров центробежного искажения позволяет на порядок улучшить значение среднеквадратичного отклонения;

**получен** набор параметров потенциальной функции движения внутреннего волчка для молекулы  $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$ ;

**получен** набор параметров, дающий возможность описывать колебательно-вращательную структуру резонирующих колебательно-вращательных состояний ( $\nu_3 = 1$ ), ( $\nu_{10} = 2$ ), ( $\nu_8 = \nu_{10} = 1$ ) и ( $\nu_{12} = 1$ ) в молекуле  $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис со среднеквадратичным отклонением  $2,2 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ .

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

**определены** спектроскопические параметры взаимодействующих состояний в результате учёта многочисленных резонансных взаимодействий при формулировке и построении эффективных гамильтонианов исследуемых молекул;

**улучшены** параметры, определяющие структуру основного колебательного состояния для молекулы  $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

**получен** большой объём новых высокоточных данных о колебательно-вращательных и торсионно-вращательных энергетических спектрах молекул  $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ -цис,  $\text{CH}_2\text{DOH}$  и  $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$ . В общей сложности около 1800 торсионно-вращательных линий были отнесены к торсионным подполосам молекулы  $\text{CH}_2\text{DOH}$ , более 180 переходов основного торсионного состояния

были определены для молекулы  $\text{CH}_2\text{DCONH}_2$  и более 3500 колебательно-вращательных линий были отнесены к полосам  $\nu_{12}$ ,  $2\nu_{10}$ ,  $\nu_6$  зарегистрированных с высоким разрешением в инфракрасном диапазоне. Эти новые данные могут быть использованы для решения различных задач, например, для расчетов спектров излучения или рассеяния, вычисления термодинамических функций указанных молекул;

**полученная информация является** существенным дополнением к имеющимся спектроскопическим банкам данных HITRAN и GEISA.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

**согласованность** результатов и выводов с современными представлениями теоретической колебательно-вращательной спектроскопии и с результатами других авторов (в тех случаях, когда это было возможно), а также с результатами соответствующих экспериментальных исследований;

**использованы** современные методики сбора и обработки исходной информации;

**концепция постановки задачи**, а также план работ основывается на многолетнем опыте выполнения подобных исследований, проводимых в группе молекулярной спектроскопии высокого разрешения НИ ТПУ;

**некоторая часть полученных результатов** уточняет ранее известные данные, но не противоречит им.

**Личный вклад соискателя** состоит в разработке нового метода построения гамильтониана для анализа структурно нежестких молекул, обладающих асимметричным внутренним волчком, непосредственном проведении анализа всех зарегистрированных спектров, рассмотрении свойств симметрии исследуемых молекул, определении типов взаимодействий и идентификации линий в спектрах, решении обратных задач, анализе резонансных взаимодействий и численных расчётов параметров моделей, сделаны выводы по результатам исследования.

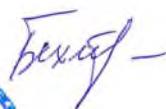
Диссертация является законченной научно-квалификационной работой, в которой было получено большое количество новой высокоточной

спектроскопической информации о молекулах монодейтерированного метанола, монодейтерированного ацетамида и дважды дейтерированного этилена цис конформации и соответствует п. 8 «Порядка присуждения учёных степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете» (приказ № 93/од от 6 декабря 2018 г.).

На заседании 20 марта 2020 года диссертационный совет ДС.ТПУ.02 принял решение присудить Конову Ивану Александровичу учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет ДС.ТПУ.02 в количестве 7 человек, из них 5 докторов наук и 2 PhD по защищаемой специальности 01.04.05 – Оптика, участвующих в заседании, из 3 человек, входящих в состав совета, и 4 человек дополнительно введённых в состав совета, проголосовали: за «7», против «нет», недействительных бюллетеней «нет».

Заместитель председателя  
диссертационного совета  
ДС.ТПУ.02



Бехтерева Елена Сергеевна

Учёный секретарь  
диссертационного совета  
ДС.ТПУ.02



Фомченко Анна Леонидовна

20 марта 2020 г.

