

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

экспертной комиссии диссертационного совета ДС.ТПУ.02 на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национального исследовательского Томского политехнического университета» по предварительному рассмотрению диссертации Коновой Юлии Владимировны на тему «Спектроскопия высокого разрешения многоатомных молекул на примере молекулы $C_2H_2D_2$ -цис», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика

«12» 10 2020 г.

Комиссия диссертационного совета ДС.ТПУ.02 в составе:

Председатель: Уленков Олег Николаевич – д.ф.-м.н., профессор, профессор Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов Национального исследовательского Томского политехнического университета;

Члены комиссии:

Бехтерева Елена Сергеевна – д.ф.-м.н., доцент, профессор Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов Национального исследовательского Томского политехнического университета;

Онопенко Галина Александровна – д.ф.-м.н., с.н.с., и.о. заведующего кафедрой прикладной математики общеобразовательного факультета Томского государственного архитектурно-строительного университета;

Петрова Татьяна Михайловна – д.ф.-м.н., с.н.с., ведущий научный сотрудник лаборатории молекулярной спектроскопии Института оптики атмосферы им. В. Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук;

Фомченко Анна Леонидовна – к.ф.-м.н., Ph.D, секретарь диссертационного совета ДС.ТПУ.02, доцент Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов Национального исследовательского Томского политехнического университета,

рассмотрели диссертационную работу Коновой Юлии Владимировны на тему «Спектроскопия высокого разрешения многоатомных молекул на примере молекулы $C_2H_2D_2$ -цис», выполненную в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальном исследовательском Томском политехническом университете» (ИШФВП ТПУ).

Диссертационная работа изложена на 152 страницах и состоит из введения, трех глав, заключения, списка используемой при написании диссертации литературы из 72 наименований и одного приложения. Диссертация содержит 32 рисунка и 24 таблицы.

Комиссия провела проверку и установила идентичность текста диссертации, представленной в диссертационный совет на бумажном носителе, тексту диссертации в электронном варианте в формате *.pdf. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты.

Комиссия, предварительно рассмотрев диссертацию Коновой Юлии Владимировны на тему «Спектроскопия высокого разрешения многоатомных молекул на примере молекулы $C_2H_2D_2$ -цис», пришла к выводу о соответствии указанной диссертации требованиям п.п. 8-12 «Порядок присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете», утвержденного приказом ФГАОУ ВО НИ ТПУ от 6 декабря 2018 г. №93/од.

Тематика диссертации посвящена исследованию колебательно-вращательных спектров высокого разрешения изотополога этилена – молекулы $C_2H_2D_2$ -цис.

Целью работы является экспериментальное и теоретическое исследование количественных характеристик колебательно-вращательных спектров молекулы $C_2H_2D_2$ -цис.

Для достижения поставленной цели в диссертационной работе были решены следующие задачи:

- Разработан алгоритм и создана на этой основе программа анализа колебательно-вращательной структуры спектров молекул типа $C_2H_2D_2$ -цис с учетом различного типа резонансных взаимодействий;
- Получены параметры основного колебательного состояния (3 вращательные постоянные и 12 параметров центробежного искажения), которые можно применять для исследования любого типа полос молекулы $C_2H_2D_2$ -цис с учетом максимальных значений квантовых чисел $J_{\text{макс}} = 55$ и $K_a^{\text{макс}} = 20$;
- Проведена идентификация более 26,5 тысяч линий в диапазоне $580 - 1850 \text{ см}^{-1}$, принадлежащих 14 колебательно-вращательным полосам, у 9 колебательных состояний была впервые определена вращательная структура;
- Проведена идентификация более 5 тысяч линий в диапазоне $2400-3200 \text{ см}^{-1}$, принадлежащих 3 колебательно-вращательным полосам: $\nu_2+\nu_6$, ν_9 и ν_5 ;
- Учёт резонансных взаимодействий Ферми и Кориолиса в модели эффективного гамильтониана, разработанной для молекул типа асимметричного волчка, позволил впервые провести исследования вращательной структуры «запрещенных» колебательных состояний молекулы $C_2H_2D_2$ -цис, а также полос, обладающих малой интенсивностью;
- Получены спектроскопические параметры, описывающие не только невозмущенную структуру 24 колебательных состояний, но и параметры резонансного взаимодействия между исследуемыми состояниями молекулы $C_2H_2D_2$ -цис;
- Определены спектроскопические параметры эффективных дипольных моментов полос ν_3 и ν_{12} молекулы $C_2H_2D_2$ -цис на основе экспериментальной информации об абсолютных интенсивностях 1923 переходов.

В диссертации информация представлена логично и структурировано, обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты в области колебательно-вращательной спектроскопии. Работа имеет фундаментальный характер и содержит сведения о возможных путях использования полученных научных результатов. Текст диссертации оригинален и полностью написан автором. В материалах диссертации и автореферате не содержится сведений ограниченного распространения, работа может быть опубликована в открытой печати.

В результате проведенных исследований в диссертации: разработан алгоритм и на этой основе создана программа анализа вращательной структуры спектров сильно резонирующих колебательных полос молекул типа $C_2H_2D_2$ -цис; уточнены параметры основного колебательного состояния, которые можно применять для исследования любых типов полос молекулы $C_2H_2D_2$ -цис с учетом максимальных значений квантовых чисел $J_{\text{макс}} = 55$ и $K_a^{\text{макс}} = 20$; впервые проведены исследования вращательной структуры «запрещенных» колебательных состояний молекулы $C_2H_2D_2$ -цис, а также полос, обладающих малой интенсивностью, благодаря учёту резонансных взаимодействий Ферми и всех типов Кориолиса в модели эффективного гамильтониана; впервые определены спектроскопические параметры эффективного гамильтониана для 24 колебательных состояний молекулы $C_2H_2D_2$ -цис; впервые определены параметры эффективных дипольных моментов полос ν_3 и ν_{12} молекулы $C_2H_2D_2$ -цис. Название диссертации, ее цель и задачи содержат ключевые понятия и слова из паспорта заявленной научной специальности.

По тематике, объектам и области исследования, разработанным автором новым научным положениям, научной и практической значимости представленная диссертация соответствует специальности 01.04.05 – Оптика согласно следующим пунктам паспорта:

1. Молекулярная оптика. Дисперсия, поглощение, рассеяние света. Оптическая активность сред и структур. Оптика сред при внешних воздействиях. Оптические исследования фундаментальных свойств материи.

2. Квантовая природа света. Спонтанные и вынужденные процессы. Статистика фотонов. Оптические методы передачи и обработки информации, физические основы квантовых вычислений.
3. Люминесценция. Излучение и поглощение света изолированными и взаимодействующими атомами и молекулами. Источники света. Физические основы методов и техники спектроскопии. Лазерная спектроскопия, оптические прецизионные измерения и стандарты, спектроскопия одиночных атомов.

Основные результаты диссертации опубликованы в 18 печатных работах: 7 статей в изданиях, рекомендованных ВАК, из них 4 статьи в международных журналах, индексируемых в *Web of Science* и *Scopus*; 11 публикаций в материалах всероссийских и международных конференций.

По представленному библиографическому списку и перечню собственных публикаций автора можно сделать заключение о том, что основные положения диссертации достаточно полно изложены в опубликованных соискателем работах и апробированы на научных конференциях. Требования к публикации основных научных результатов диссертации выполнены полностью.

Анализ текстов диссертации, публикаций соискателя и списка использованных источников позволяет сделать вывод, что в диссертации заимствованные материалы и отдельные результаты приводятся со ссылками на источники заимствования или их автора.

Ссылки на библиографические источники, включая собственные публикации автора, оформлены в соответствии с требованиями стандарта, а библиографический список характеризует серьезную глубину изучения автором рассматриваемого в работе научного направления.

Заключение.

Тема и содержания диссертационной работы Коновой Юлии Владимировны «Спектроскопия высокого разрешения многоатомных молекул на примере молекулы $C_2H_2D_2$ -цис» соответствует научной специальности 01.04.05 – Оптика.

Материалы диссертации в полной мере изложены в работах, опубликованных соискателем ученой степени. Выполнены требования к публикациям основных научных результатов диссертационной работы, предусмотренные пунктами 10 и 11 Порядка присуждения ученых степеней, утвержденного приказом Национального исследовательского Томского политехнического университета от 6 декабря 2018 г. № 93/од.

В диссертации отсутствуют материалы, заимствованные без ссылки на авторов и источники заимствования, результаты научных работ, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, без ссылок на соавторов. Автореферат отражает содержание диссертационной работы.

На основании вышеизложенного комиссия считает возможным принять диссертацию Коновой Юлии Владимировны «Спектроскопия высокого разрешения многоатомных молекул на примере молекулы $C_2H_2D_2$ -цис» к защите в совете ДС.ТПУ.02 на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

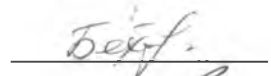
Председатель комиссии:

д.ф.-м.н., профессор

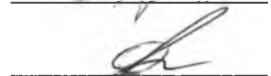
 О.Н. Уленков

Члены комиссии:

д.ф.-м.н., доцент

 Е.С. Бехтерева

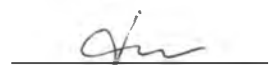
д.ф.-м.н., с.н.с.

 Г.А. Онопенко

д.ф.-м.н., с.н.с.

 Т.М. Петрова

к.ф.-м.н., PhD

 А.Л. Фомченко