

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор института спектроскопии

Российской академии наук,

профессор

В.Н. Задков

«21» сентября 2018 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института спектроскопии Российской академии наук на диссертацию Аслаповской Юлии Сергеевны на тему: «Спектроскопия высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка на примере молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и её изотополога $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ », представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

Диссертационная работа Аслаповской Ю.С. посвящена анализу колебательно-вращательных спектров высокого разрешения молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ с целью получения новой высокоточной информации о колебательных состояниях этих молекул. **Актуальность исследования** обусловлена тем, что детальное знание колебательно-вращательной структуры спектров молекул необходимо для решения широкого круга научных и практических задач, таких как атмосферная оптика, спектроскопия атмосфер планет Солнечной системы и экзопланет, производство сверхчистых веществ, экологический контроль окружающей среды, лазерная техника и ряда других.

Положения, выносимые на защиту, находят развернутое и аргументированное подтверждение в тексте диссертационного исследования, а также в 33 публикациях диссертанта, двенадцать из которых представлены в журналах из списка ВАК.

Научные положения и выводы полностью обоснованы. Достоверность результатов обеспечивается их внутренней согласованностью и совпадением в ряде случаев с известными результатами из опубликованных работ.

Структура диссертации. Диссертация Аслаповской Ю.С. состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и трех приложений. Диссертация содержит 126 страниц текста, 33 рисунка и 27 таблиц. Список цитированной литературы включает в себя 94 пункта.

В первой главе диссертации автором сделан обзор научной литературы, содержащий сведения из теории многоатомных молекул.

Рассмотрены задача построения корректного гамильтониана молекулы во внутримолекулярных координатах и методы решения соответствующего стационарного уравнения Шредингера. Изложен метод построения на основе операторной теории возмущений эффективного вращательного гамильтониана, как в случае изолированного колебательного состояния, так и при наличии резонансных взаимодействий между колебательными состояниями. Описан переход к эффективному оператору дипольного момента.

Во второй главе представлена процедура определения корректных вращательных энергий основного колебательного состояния молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$. На основе подготовленного автором из анализа инфракрасных спектров нового набора параметров основного колебательного состояния проведено исследование ряда фундаментальных комбинационных, в том числе и запрещённых по симметрии, полос, появляющихся в спектрах вследствие сильных резонансных взаимодействий. Впервые были изучены спектры «горячих» полос $\nu_7 + \nu_{10} - \nu_{10}$ и $\nu_{10} + \nu_{12} - \nu_{10}$, что позволило получить информацию о состояниях g-типа ($\nu_7 = \nu_{10} = 1$) и ($\nu_{10} = \nu_{12} = 1$).

В третьей главе изложены результаты исследования вращательной структуры спектров изотопической модификации молекулы этилена. В начале главы описана математическая модель оценки спектроскопических параметров молекулы $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$, основанная на теории изотопозамещения. Полученные значения параметров являются либо совершенно новой информацией, либо данными с существенно лучшими точностями, чем известны в литературе.

Четвертая глава посвящена исследованию абсолютных интенсивностей спектральных линий поглощения молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ в районе полос ν_9 и ν_{11} . В ходе анализа экспериментальных спектров автором впервые была получена информация о 600 значениях абсолютных интенсивностей и 98 значениях полуширин линий поглощения для указанных полос. На ее основе были определены параметры эффективного дипольного момента, которые описывают экспериментальные данные со среднеквадратичным отклонением 5%.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы работы.

Научная значимость и практическая ценность.

Результаты, полученные в данной работе, имеют как научную, так и практическую ценность. Информация о параметрах гамильтониана молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ (вращательных, центробежного искажения, резонансных взаимодействий и эффективного дипольного момента), полученная в ходе исследования тонкой структуры их спектров, может быть использована для корректного количественного предсказания характеристик спектральных линий в иных, отличных от изученного, диапазонах шкалы длин волн. Результаты диссертации также могут быть использованы для изучения колебательно-вращательных структур не только этих молекул, но и других изотопических модификаций этилена.

Работа Аслаповской Ю.С. выполнена на высоком научном уровне и представляет существенный вклад в развитие молекулярной спектроскопии.

Достоверность, новизна и практическая значимость исследований, представленных в работе, не вызывают сомнений и опираются на теоретические положения и выводы. Все результаты достаточно полно отражены в публикациях и докладывались на международных конференциях.

Недостатки работы и замечания. По диссертации можно сделать несколько замечаний:

1. Название диссертации «Спектроскопия ... молекул типа асимметричного волчка на примере молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и ее изотополога $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$ » предполагает обобщение развитых методов на широкий класс молекул, где $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$ будут даны как примеры. В действительности же работа посвящена исследованию именно молекулы этилена и одного ее изотополога, то есть правильнее и точнее было бы назвать работу «Спектроскопия ... молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и ее изотополога $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$ ».

2. Термин «тонкая структура», используемый для наблюдаемой структуры колебательных полос, кажется несколько устаревшим и не совсем точным. «Тонкая структура» молекулярных (как и атомных) спектров обычно ассоциируется с расщеплением спектральных линий, связанным с ненулевым орбитальным моментом электронов и/или их результирующим спином. В диссертационной работе речь идет просто о вращательной структуре инфракрасных колебательных спектров, записанных с высоким разрешением.

3. По тексту диссертации встречается достаточно много синтаксических ошибок и неудачных выражений, например,

Стр. 4. «... точность таких расчетов ... хуже экспериментальных на несколько порядков ...»

стр. 31. «Молекула $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ имеет плоскую симметричную форму и принадлежит к классу молекул типа асимметричного волчка ...»

стр. 31. «... параметром асимметричности ...»

стр. 33. «... вращательная структура ... может быть улучшена»;

стр. 41. «Кроме 3644 энергий, ...»;

стр. 41. «Значения верхних энергий, ...»;

стр. 60. «... анализ высокого разрешения инфракрасных спектров ...».

Высказанные замечания не снижают общей положительной оценки выполненного диссертационного исследования и не влияют на высокую научную значимость полученных автором основных теоретических и практических результатов.

Содержание диссертации, выдвинутые научные положения и сформулированные в ней выводы дают основание считать, что

поставленные задачи успешно решены, и диссертантом достигнута цель исследования.

По результатам обсуждения, несмотря на выявленные незначительные недостатки, диссертация «Спектроскопия высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка на примере молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и её изотополога $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ » признана научной квалифицированной работой, полностью соответствующей требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. п. 9 (ред. от 28.08.2017), а ее автор, Аслаповская Юлия Сергеевна, заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика. Автореферат диссертации в полной мере отражает ее содержание, а опубликованные работы раскрывают основные положения диссертационного исследования.

Отзыв обсужден и утвержден на заседании отдела молекулярной спектроскопии Института спектроскопии Российской академии наук 20 сентября 2018 г., протокол № 3.

Зам. директора по научной работе
Института спектроскопии РАН,
зав. отделом молекулярной спектроскопии,
д. ф.-м. н. (специальность 01.04.05 - Оптика)
Сурин Леонид Аркадьевич


Л.А. Сурин

Почтовый адрес: Федеральное государственное
бюджетное учреждение науки Институт спектроскопии
Российской академии наук, ИСАН, 108840, г. Москва, г. Троицк,
ул. Физическая, 5, тел. (495) 851-05-79, эл. почта: isan@isan.troitsk.ru

