

ОТЗЫВ

официального оппонента о диссертации Аслаповской Юлии Сергеевны «Спектроскопия высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка на примере молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и ее изотополога $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ », представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Изучение спектров многоатомных молекул с разрешенной вращательной структурой является важнейшей областью науки, имеющей приложения в астрофизических и атмосферных исследованиях. Изучению спектров поглощения и рассеяния этилена, одной из простейших углеводородных молекул, было посвящено множество, как экспериментальных, так и теоретических исследований. Анализ измеренных спектров C_2H_4 , определение центров спектральных линий и их интенсивностей, коэффициентов уширения и сдвига давлением, колебательно – вращательных энергетических уровней, позволяют получить уникальную информацию о строении молекулы, внутренней динамике и силах межмолекулярного взаимодействия, создать теоретическую модель, описывающую спектры с точностью, близкой к точности измерений.

Актуальность исследования. Диссертация Аслаповской Ю.С. направлена на теоретический анализ экспериментальных спектров высокой точности, разработку теоретических моделей, описывающих вращательную структуру энергетического спектра молекулы этилена. Задачей работы также является определение интенсивностей линий, их моделирование на основе эффективного оператора дипольного момента, определение из спектров формы контура, коэффициентов уширения собственным давлением. Поэтому тема диссертации, цель и решаемые задачи являются актуальными.

Содержание работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка цитируемой литературы и трех приложений.

Первая глава диссертации является обзорной. В ней автор приводит основные идеи и методы теории колебательно – вращательных спектров молекул, Фурье – спектроскопии ИК диапазона и элементы теории взаимодействия электромагнитного излучения с веществом.

Во второй главе приводятся результаты анализа спектров этилена в нескольких спектральных областях около 11 и 7 мкм. В результате получен обширный набор высокоточных уровней энергии, основного и нескольких возбужденных колебательных состояний, разработаны теоретические модели, учитывающие сложный характер резонансных взаимодействий. При решении обратных задач определены вращательные, центробежные и резонансные постоянные молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ описывающие экспериментальные спектры с высокой точностью.

В третьей главе диссертации представлены результаты анализа спектров изотопной модификаций $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ в области 10 и 6 мкм. На основе теории изотопозамещения проведены оценки некоторых спектроскопических постоянных изотополога $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$, исходя из аналогичных постоянных основной изотопической модификации этилена. Проведен анализ спектров, определены энергетические уровни, предложена теоретическая модель, позволяющая описать экспериментальные спектры с высокой точностью.

В четвертой главе диссертации представлены результаты исследования спектров этилена в области 3 мкм. Проведено отнесение линий, на основе метода эффективных операторов разработана теоретическая модель, позволяющая рассчитывать центры линий и их интенсивности с точностью, близкой к точности измерений. Для 200 линий определены интенсивности, для 98 линий подгонкой параметров контура Армана – Тран к измеренному пропусканию определены коэффициенты уширения собственным давлением.

В Заключение приводятся основные результаты работы.

В Приложениях А, Б и В представлены линии горячих полос, уровни энергии двух состояний молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и колебательно – вращательные переходы в двух полосах изотополога $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$.

Оценивая в целом диссертационную работу Аслаповской Ю.С. считаю необходимым отметить следующее:

Научная значимость работы. В работе проведен теоретический анализ уникальных спектров, зарегистрированных при различных условиях, с высоким спектральным разрешением. Автором получен большой массив новых данных о колебательно – вращательном энергетическом спектре 22-х колебательных состояниях, соответствующих 34000 переходов. В диссертации разработаны теоретические модели, основанные на методе эффективных операторов, эти

модели описывают измеренные данные - центры линий на уровне близком к точности измерений. Автором успешно решена трудная теоретическая задача описания колебательно – вращательных состояний молекул в условиях многочисленных резонансов. Для большого числа линий определены интенсивности и коэффициенты уширения, проведено моделирование интенсивностей линий, определены параметры эффективного дипольного момента. В целом, новые данные, полученные при анализе экспериментальных спектров, позволяют поставить задачу о новом определении поверхностей внутримолекулярной потенциальной энергии и дипольного момента молекулы этилена.

Практическая ценность результатов диссертации очевидна. Полученные в диссертации новые данные дополняют массив спектроскопической информации в банках HITRAN и GEISA. Их можно использовать для разработки новых способов определения концентрации этилена в различных средах, а также для решения различных прикладных задач атмосферной оптики и астрофизики.

Достоверность полученных в диссертации результатов несомненна, поскольку они получены в соответствии с основными принципами квантовой механики молекул и хорошо обоснованными вычислительными методами теории молекулярных спектров, таких как операторная теория возмущений, теория изотопозамещения и т.д. Достоверность результатов диссертации подтверждается хорошим согласием между рассчитанными центрами и интенсивностями линий и величинами, полученными непосредственно из анализа экспериментальных спектров.

Новизна результатов диссертации также несомненна. В диссертации впервые представлен обширный набор спектроскопических данных для молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$, впервые определены из спектров параметры эффективных гамильтонианов, дипольного момента, интенсивности линий и коэффициенты уширения.

Апробация материалов диссертации и публикации. Результаты диссертационной работы Аслаповской Ю.С. опубликованы в 33 печатных работах, в том числе в научных изданиях, имеющих высокий рейтинг (Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Известия ВУЗОВ. Физика), а также докладывались на Российских и Международных конференциях.

Личный вклад соискателя очевиден, он подтверждается наличием пяти работ без соавторов.

В целом диссертация Аслаповской Ю.С. выполнена на высоком научном уровне и содержит новые результаты необходимые для различных приложений. Автореферат диссертации точно отражает ее содержание.

Недостатки работы и замечания .

1) При анализе спектров этилена автором решена достаточно трудная теоретическая проблема – решение обратной задачи при наличии множественных резонансов в колебательно - вращательном спектре. Решение найдено на основе предварительных оценок вращательных, центробежных и резонансных постоянных «темных» состояний, которые фиксировались в процессе подгонки методом наименьших квадратов. Такой прием позволил описать энергетический спектр вполне удовлетворительно. Однако результаты подгонки зависят от значений фиксированных спектроскопических постоянных. Недостатком является то, что в работе нет обсуждения этого, на мой взгляд важного, момента. Можно только предполагать, что автор проводила необходимые тестовые расчеты для определения устойчивости решения в зависимости от фиксированных параметров.

2) В диссертации приведены коэффициенты уширения линий $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ собственным давлением. Это весьма важный для приложений экспериментальный результат. Но в работе нет обсуждения этих результатов, нет сравнения с данными других работ.

3) В диссертации имеются не исправленные опечатки. Например, формулы (1.2), (1.41), (1.44), (1.48), (4.2) и (4.3), правила отбора на стр. 32 и 61 приведены с опечатками.

Заключение. Отмеченные выше недостатки диссертации не влияют на основные результаты и выводы работы. Считаю, что в диссертации Аслаповской Юлии Сергеевны «Спектроскопия высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка на примере молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и ее изотополога $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ » представлено решение актуальной научной задачи, она содержит новые результаты, имеющие существенное значение для решения практических задач спектроскопии молекул. Диссертация полностью соответствует требованиям п. 9 действующего «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико

– математических наук. Автор диссертации, Аслаповская Юлия Сергеевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико – математических наук по специальности 01.04.05. – оптика.

Официальный оппонент,
Быков Александр Дмитриевич доктор физико – математических наук
по специальности 01.04.05 - оптика, профессор по специальности «оптика»,
главный научный сотрудник
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева Сибирского отделения
Российской академии наук
03 октября 2018 г.



634055, Россия, Томск,
площадь Академика Зуева, 1.
Тел. (3822)492738
Факс (3822)492085
e-mail adbykov@rambler.ru
director@iao.ru, <https://www.iao.ru>

Подпись А.Д.Быкова заверяю
Ученый секретарь ИОА СО РАН,
к.ф.-м.н.

04 октября 2018 г.



О.В. Тихомирова