

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Аслаповской Юлии Сергеевны «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 исследованию колебательно-вращательных спектров высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка, а именно, анализу тонкой структуры зарегистрированных впервые, либо с существенно лучшими характеристиками, чем ранее, спектров высокого разрешения  $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$  и  $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$  с целью получения новой информации о возбужденных колебательных состояниях и на этой основе определению равновесных спектроскопических параметров этих молекул.

**Актуальность.** Колебательно-вращательные спектры высокого разрешения являются наиболее полным и надежным источником информации о характере внутримолекулярных взаимодействий состояний и свойств молекул. Информация о спектроскопических характеристиках молекул необходима для широкого круга приложений в атмосферной оптике, лазерной физике, газоанализе и др. В связи с этим, на протяжении многих лет, исследование тонкой структуры спектров многоатомных молекул является актуальной задачей. Одной из основных проблем, затрудняющих интерпретацию колебательно-вращательных спектров многоатомных молекул возникают из-за наличия сильных резонансных взаимодействий между близко расположенными колебательными состояниями, которые делают неработоспособной модель изолированного колебательного состояния. Поэтому, в диссертационной работе Ю. С. Аслаповской основное внимание уделено решению практически важных проблем, возникающих при вычислении спектроскопических и молекулярных параметров, а именно: выбору корректных математических моделей, учитывающих наличие большого количества резонансных взаимодействий.

**Научная значимость и практическая ценность.** Полученные в диссертационной работе Аслаповской Ю.С. параметры основных колебательных состояний позволяют с высокой точностью описывать равновесные вращательные структуры молекул  $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$  и  $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$  используя в качестве входных лишь экспериментально полученные данные, без какой либо информации о потенциальной функции молекул. 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 спектров этих молекул, может быть использована для корректного количественного предсказания характеристик спектральных линий в иных отличных от изученного диапазона шкалы длин волн. Результаты

диссертации могут быть использованы также для изучения колебательно-вращательных структур не только молекул  $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$  и  $^{13}\text{C}_{12}\text{CH}_4$ , но и других изотопических модификаций этилена. Так же практическая значимость результатов заключается в необходимости подобной высокоточной спектроскопической информации для баз спектроскопических данных (напр. HITRAN и GEISA.)

**Достоверность полученных результатов** не вызывает сомнений, поскольку она обоснована основными принципами колебательно-вращательной спектроскопии молекул, хорошим согласием между экспериментальными и рассчитанными значениями уровней энергии.

**Научная новизна.** Результаты, представленные в диссертационной работе Аслаповской Ю.С. являются новыми. Автором были исследованы спектры ряда впервые зарегистрированных колебательно-вращательных полос молекул  $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$  и  $^{13}\text{C}_{12}\text{CH}_4$ . В работе были впервые получены или существенно уточнены данные о 22 возбужденных колебательных состояниях этих молекул. Именно в рамках настоящей диссертационной работы впервые были представлены результаты исследования интенсивностей и полуширин спектральных линий поглощения, а так же параметры эффективного дипольного момента ряда полос молекулы  $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ .

#### **Содержание работы.**

Во **введении** обоснованы актуальность темы исследования, степень ее научной разработки, определены объекты (предметы), цели, задачи и методы исследования, обозначены научная и практическая значимость, отмечена научная новизна, сформулированы положения, выносимые на защиту и сведения об апробации исследования.

**Первая глава** диссертации посвящена описанию необходимых для понимания оригинальной части работы принципов и некоторых методов колебательно-вращательной теории, включая способ построения квантово-механического гамильтониана для произвольной молекулы и основные сведения из операторной теории возмущений. В конце первой главы приведены краткие выводы из полуклассической теории взаимодействия света с веществом и основ Фурье спектроскопии.

Во **второй и третьей главах** представлены результаты исследования спектров высокого разрешения молекул  $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$  и  $^{13}\text{C}_{12}\text{CH}_4$ . Четко и подробно рассмотрена процедура определения корректных вращательных энергий основных колебательных состояний этих молекул, что в последующем способствовало в определении структуры возбужденных колебательных состояний. В частности, были представлены результаты исследований 5 впервые зарегистрированных запрещенных по симметрии полос. Рассмотрена процедура извлечения информации о колебательно-вращательных состояниях g-типа из колебательно-вращательных спектров поглощения, при помощи исследования «горячих» полос.

В **четвертой главе** обсуждаются результаты исследования как положений линий, так и абсолютных интенсивностей спектральных линий поглощения молекулы  $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ .

Подобного рода исследования позволили автору впервые определить параметры эффективного дипольного момента, полуширины и коэффициенты уширения спектральных линий поглощения в диапазоне 2900-3300  $\text{см}^{-1}$ .

В заключении исследования диссертант формулирует основные обобщающие выводы. Научные положения, выводы и рекомендации по их использованию, сформулированные в диссертации, логичны, последовательны и основательны. Общие итоги работы характеризуют научную новизну и практическую значимость работы.

По содержанию и оформлению работы можно сделать следующие замечания:

1. На странице 31 предложение «... ось X перпендикулярна связи C–C и плоскости молекулы, а ось Y перпендикулярна только плоскости в которой расположена молекула.» не согласуется с рисунком 2.1, которому оно должно соответствовать, а также с предположением о декардовости системы координат XYZ. Если обе оси перпендикулярны одной и той же плоскости (а именно плоскости молекулы), то они оказываются параллельны друг другу. Следует исправить на «ось X лежит в плоскости молекулы и перпендикулярна связи C–C».

2. На странице 33, из рисунка 2.2 складывается впечатление, что колебания  $\nu_{10}$  протекают со смещением центра масс молекулы, тогда как на странице 13 декларируется исключение смещения центра масс из общего рассмотрения.

3. На странице 66 в таблице 3.2 выбрано не слишком удачное обозначение для столбца 5. При первом взгляде создаётся ошибочное впечатление, что в столбце приведены отношения 4го и 3го столбцов, тем более что некоторые коэффициенты столбца 5 близки к единице.


4. Конец предложения «В столбце 5 таблицы 3.2 показаны результаты подгонки того же набора параметров, что и в столбце 3, но с использованием значений комбинационных разностей основного состояния определенных в данной работе.» со страницы 69 предположительно следует заменить на «... определённых в работе [44].». Иначе теряются различия между столбцами 4 и 5 таблицы 3.2, а также теряется смысл заглавия столбца 5 таблицы 3.2.

5. На странице 69 написано «Все спектры были откалиброваны с помощью линий молекулы  $\text{N}_2\text{O}$ », что противоречит таблице 3.3, из которой следует, что спектры VII, VIII, и IX были откалиброваны с помощью линий молекулы  $\text{H}_2\text{O}$ .

6. На странице 86 вместо "332 уровней энергии" просится написать "332 уровня энергии"

**Заключение.** Отмеченные недостатки являются незначительными и в целом никак не влияют на результаты, их актуальность и научную новизну. Отдельно следует отметить недоступные для вариационной спектроскопии высокие точности порядка  $10^{-4}$  см<sup>-1</sup> и высокую размерность задачи (бти атомные молекулы); глубокое обоснование результатов через многоплановое сравнение не только с предыдущими работами в чистом виде, но и с комбинированными исследованиями, в которых лишь часть параметров берётся из предыдущих работ (комбинационные разности основного состояния), а другие непосредственно рассчитываются; понятные, наглядные и красивые рисунки, понятный язык изложения.

Таким образом, диссертационная работа Ю. С. Аслаповской по поставленным задачам, уровню выполнения и научной новизне полученных результатов полностью соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям (п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденных Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 N 842 (ред. от 28.08.2017), а ее автор - Ю.С. Аслаповская заслуживает присуждения искомой степени по специальности 01.04.05 - оптика.

Официальный оппонент   
Овсянников Роман Ильич  
кандидат физико-математических наук  
по специальности 01.04.03 - радиофизика,  
научный сотрудник отдела 380  
Федерального государственного бюджетного научного учреждения  
«Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики  
Российской академии наук»  
603950 г. Нижний Новгород, БОКС – 120,  
ул. Ульянова 46. E-mail: dir@ipfran.ru  
Тел.: (831) 436 62 02

Подпись Р.И. Овсянникова заверяю

Ученый секретарь ИПФ РАН

27.09.2018



И.В. Корюкин