

СВЕДЕНИЯ О РЕЗУЛЬТАТАХ ПУБЛИЧНОЙ ЗАЩИТЫ ДИССЕРТАЦИИ

Диссертационный совет Д 212.267.04, созданный на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», извещает о результатах состоявшейся 25 октября 2018 года публичной защиты диссертации Аслаповской Юлии Сергеевны «Спектроскопия высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка на примере молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и её изотополога $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ » по специальности 01.04.05 – Оптика на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

На заседании присутствовали 20 из 25 членов диссертационного совета, из них 4 доктора наук по специальности 01.04.05 – Оптика:

- | | |
|--|----------|
| 1. Войцеховский А. В., доктор физико-математических наук, профессор, заместитель председателя диссертационного совета, | 01.04.05 |
| 2. Пойзнер Б. Н., кандидат физико-математических наук, профессор, учёный секретарь диссертационного совета, | 01.04.03 |
| 3. Артюхов В. Я., доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, | 01.04.21 |
| 4. Беличенко В. П., доктор физико-математических наук, доцент, | 01.04.03 |
| 5. Дмитренко А. Г., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.03 |
| 6. Донченко В. А., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.21 |
| 7. Дунаевский Г. Е., доктор технических наук, профессор, | 01.04.03 |
| 8. Козырев А. В., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.03 |
| 9. Копылова Т. Н., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.21 |
| 10. Лосев В. Ф., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.21 |
| 11. Соколова И. В., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.21 |
| 12. Солдатов А.Н., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.21 |
| 13. Соснин Э.А., доктор физико-математических наук, | 01.04.05 |
| 14. Тарасенко В.Ф., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.21 |
| 15. Улеников О. Н., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.05 |
| 16. Фисанов В. В., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.03 |
| 17. Черепанов В. Н., доктор физико-математических наук, доцент, | 01.04.05 |
| 18. Шандаров С. М., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.03 |
| 19. Юдин Н. А., доктор технических наук, старший научный сотрудник, | 01.04.21 |
| 20. Якубов В. П., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.03 |

В связи с невозможностью присутствия на заседании председателя диссертационного совета доктора физико-математических наук, профессора Майера Георгия Владимировича по его письменному поручению заседание провёл заместитель председателя диссертационного совета доктор физико-математических наук, профессор Войцеховский Александр Васильевич.

По результатам защиты диссертации тайным голосованием (результаты голосования: за присуждение ученой степени – 17, против – 1, недействительных бюллетеней – 2) диссертационный совет принял решение присудить Ю. С. Аслаповской ученую степень кандидата физико-математических наук.

**Заключение диссертационного совета Д 212.267.04,
созданного на базе федерального государственного автономного
образовательного учреждения высшего образования
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации,
по диссертации на соискание учёной степени кандидата наук
аттестационное дело № _____**

решение диссертационного совета от 25.10.2018 № 149

О присуждении **Аслаповской Юлии Сергеевне**, гражданину Российской Федерации, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация **«Спектроскопия высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка на примере молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и её изотополога $^{13}\text{C}^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ »** по специальности **01.04.05** – Оптика принята к защите 28.06.2018 (протокол заседания № 141) диссертационным советом Д **212.267.04**, созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, приказ о создании диссертационного совета № 714/нк от 02.11.2012).

Соискатель **Аслаповская Юлия Сергеевна**, 1991 года рождения.

В 2014 году соискатель окончила федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

В 2018 году соискатель очно окончила аспирантуру федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

Работает в должности ассистента Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена в Исследовательской школе физики высокоэнергетических процессов федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, **Уленков Олег Николаевич**, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», исследовательская школа физики высокоэнергетических процессов, профессор.

Официальные оппоненты:

Быков Александр Дмитриевич, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт оптики атмосферы им. В. Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория молекулярной спектроскопии, главный научный сотрудник

Овсянников Роман Ильич, кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук», отдел 380, научный сотрудник

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт спектроскопии Российской академии наук, г. Москва, в своём положительном отзыве, подписанном **Суриным Леонидом Аркадьевичем** (доктор физико-математических наук, заместитель директора по научной работе, отдел молекулярной спектроскопии, заведующий отделом), указала, 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. Ю. С. Аслаповской предложена процедура определения корректных

вращательных энергий основного колебательного состояния молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$; из анализа инфракрасных спектров подготовлен новый набор параметров основных колебательных состояний молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{12}\text{C}^{13}\text{CH}_4$, на основе которого проведено исследование ряда фундаментальных комбинационных, в том числе и запрещённых по симметрии полос, появляющихся в спектрах вследствие сильных резонансных взаимодействий; впервые изучены спектры «горячих» полос $\nu_7+\nu_{10}-\nu_{10}$ и $\nu_{10}+\nu_{12}-\nu_{10}$ молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$, что позволило получить информацию о состояниях g-типа ($\nu_7 = \nu_{10} = 1$) и ($\nu_{10} = \nu_{12} = 1$); впервые получена информация о 200 значениях абсолютных интенсивностей и 98 значениях полуширин линий поглощения для молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$, на основании которой определены параметры эффективного дипольного момента, описывающие экспериментальные данные со среднеквадратичным отклонением 5 %. Полученные значения параметров являются либо совершенно новой информацией, либо данными с существенно лучшими точностями, чем известны в литературе. Полученные результаты имеют как научную, так и практическую ценность, могут быть использованы для изучения колебательно-вращательных структур других изотопических модификаций этилена. Информация о параметрах гамильтониана молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}_2\text{H}_4$ (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.

Соискатель имеет 35 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 33 работы, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 12 работ (из них 4 статьи в зарубежных научных журналах, входящих в Web of Science, и 8 статей в российском научном журнале, переводная версия которого входит в Web of Science), в прочих российских научных журналах опубликованы 2 работы, в сборниках материалов всероссийских и международных научных и научно-практических конференций и симпозиума (из них 7 зарубежных конференций) опубликовано 18 работ, методических указаний опубликовано – 1. Общий объём публикаций – 12.50 а.л., авторский вклад – 5.41 а.л.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем учёной степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации, опубликованные в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, на соискание учёной степени доктора наук:

1. Ulenikov O. N. High resolution spectroscopic study of C_2H_4 : re-analysis of the ground state and ν_4 , ν_7 , ν_{10} , and ν_{12} vibrational bands / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, **Yu. S. Aslapovskaya**, V.-M. Horneman // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2013. – Vol. 118. – P. 14–25. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2012.11.032. – 1.35 / 0.8 а.л. (*Web of Science*).

2. Ulenikov O. N. High resolution FTIR study of the $\nu_7+\nu_{10}-\nu_{10}$ and $\nu_{10}+\nu_{12}-\nu_{10}$ «hot» bands of C_2H_4 / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, G. A. Onopenko, **Yu. S. Aslapovskaya**, K.-H. Gericke, S. Bauerecker, V.-M. Horneman // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2014. – Vol. 149. – P. 318–333. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2014.08.013. – 1.44 / 0.25 а.л. (*Web of Science*).

3. Ulenikov O. N. Ethylene-1- ^{13}C ($^{13}C^{12}CH_4$): first analysis of the ν_2 , ν_3 and $2\nu_{10}$ bands and re-analysis of the ν_{12} band and of the ground vibrational state / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **Yu. S. Aslapovskaya**, T. L. Tan, C. Sydow, C. Maul, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2017. – Vol. 187. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.10.009. – P. 403–413. – 1.21 / 0.7 а.л. (*Web of Science*).

4. **Аслаповская Ю. С.** Анализ основного колебательного состояния молекулы этилена-1- ^{13}C ($^{13}C^{12}CH_4$) / Ю. С. Аслаповская, О. В. Громова, К. Б. Берёзкин, И. А. Конов, К. Зидо // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60, № 2. – С. 68–73. – 0.79 / 0.59 а.л.

в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science:

Aslapovskaya Yu. S. Analysis of the ground vibrational state of the ethylene -1- ^{13}C ($^{13}C^{12}CH_4$) molecule / Yu. S. Aslapovskaya, O. V. Gromova, K. B. Berezkin,

I. A. Konov, K. Zido // Russian Physics Journal. – 2017. – Vol. 60, № 2. – P. 273–278. – DOI: 10.1007/s11182-017-1071-1.

5. Аслаповская Ю. С. Определение параметров эффективного колебательно-вращательного гамильтониана полосы $\nu_7+\nu_8$ молекулы этилен-1- ^{13}C / Ю. С. Аслаповская // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2018. – Т. 61, № 2. – С. 87–90. – 0.6 а.л. (*Web of Science*).

На автореферат поступили 5 положительных отзывов. Отзывы представили:

1. **М. Ю. Третьяков**, д-р физ.-мат. наук, заведующий отделом Микроволновой спектроскопии Федерального исследовательского центра Института прикладной физики РАН, г. Нижний Новгород, и **Н. Ф. Зобов**, канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник отделом Микроволновой спектроскопии Федерального исследовательского центра Института прикладной физики РАН, г. Нижний Новгород, *без замечаний*.
2. **Т. И. Величко**, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры физики Тюменского индустриального университета, и **П. Ю. Третьяков**, канд. физ.-мат. наук, заведующий кафедрой физики Тюменского индустриального университета, *с замечанием*: в автореферате после краткого изложения параграфа 3.2 следует параграф 3.4.
3. **В. Г. Багров**, д-р физ.-мат. наук, проф., профессор кафедры квантовой теории поля Национального исследовательского Томского государственного университета, *с замечанием* о небрежности в оформлении автореферата, в том числе рисунков и таблиц.
4. **Ю. Б. Моржикова**, канд. физ.-мат. наук, доцент отделения естественных наук Национального исследовательского Томского политехнического университета, *без замечаний*.
5. **Н. И. Москаленко**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры энергетического машиностроения Казанского государственного энергетического университета, *без замечаний*.

В отзывах отмечается, что спектроскопические и внутримолекулярные характеристики изотопомеров этилена необходимы для решения задач физической химии, экологии, астрофизики. Анализ экспериментальных спектров этой молекулы затруднен многочисленными резонансными взаимодействиями близко расположенных колебательных состояний и их высокой плотностью, что обусловило актуальность темы исследования. Ю. С. Аслаповской представлены подходы в изучении колебательно-вращательных спектров, позволяющие получить данные,

в первую очередь, об основных колебательных состояниях этих молекул, что является важной задачей, в том числе и для изучения возбужденных состояний; выполнен анализ спектров высокого разрешения ряда колебательных полос молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ с учетом резонансных взаимодействий и получены параметры, позволившие идентифицировать переходы в «горячих» полосах и рассчитать энергии колебательно-вращательных состояний; определены параметры эффективного дипольного момента и измерены полуширины линий поглощения; на основе теории изотопозамещения разработана математическая модель оценки спектроскопических параметров изотопической модификации $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ этилена; исследованы экспериментальные спектры $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ в области $640\text{--}1700\text{ см}^{-1}$; получены параметры основного колебательного состояния, использованные для последующего анализа спектров высокого разрешения в диапазонах $1200\text{--}2050\text{ см}^{-1}$. Исследование вносит значительный вклад в развитие подходов к анализу оптических спектров высокого разрешения. Полученные результаты по параметрам спектральных линий молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ могут послужить дополнением к известным базам данных GEISA, HITRAN, IUPAC, SPECTRA.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что **А. Д. Быков** – известный высококвалифицированный специалист в области спектроскопии внутри- и межмолекулярных взаимодействий; **Р. И. Овсянников** обладает многолетним опытом в области исследования фундаментальных свойств веществ методами молекулярной спектроскопии; на базе **Института спектроскопии Российской академии наук** проводятся исследования в различных областях спектроскопии, в том числе и спектроскопии молекул.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработан алгоритм, на основе которого создана тестовая программа, позволяющая определить корректные вращательные энергии основных колебательных состояний молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$;

показано, что исследование переходов в «горячих» полосах $\nu_7 + \nu_{10} - \nu_{10}$ и $\nu_{10} + \nu_{12} - \nu_{10}$ позволяет получить информацию о состояниях g-типа ($\nu_7 = \nu_{10} = 1$) и ($\nu_{10} = \nu_{12} = 1$);

получена новая физическая информация о вращательных параметрах, параметрах центробежного искажения и резонансных взаимодействий, а также параметрах дипольного момента путем исследования спектров высокого разрешения молекул типа асимметричного волчка ($^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$) для всех фундаментальных полос, ряда комбинационных и обертоновых полос.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказано, что реализованный для описания тонкой вращательной структуры основного колебательного состояния молекулы этилена и её изотопологов подход позволяет с высокой точностью описывать исходные экспериментальные данные;

применительно к проблематике диссертации результативно использованы методы квантовой механики, теории групп, теории изотопозамещения, операторной теории возмущений, методы Фурье-спектроскопии;

изложены методы и подходы, позволяющие разрешить ряд проблем, возникающих при интерпретации спектров сильно взаимодействующих колебательно-вращательных полос молекулы этилена и её изотополога, связанных с неоднозначностями и сильной корреляцией спектроскопических параметров.

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

представлены методические рекомендации для расчета параметров резонансных взаимодействий по известным из эксперимента высокоточным значениям параметров различных типов расщеплений;

отмечена перспективность использования полученных данных о спектроскопических параметрах 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) для корректного количественного предсказания характеристик спектральных линий в иных, отличных от изученного диапазона, длин волн;

получена новая высокоточная информация о 22 возбужденных колебательных состояниях молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$, в общей сложности содержащих около 34000 колебательно-вращательных переходов.

Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования. Полученные результаты, а также разработанные методы и подходы могут найти применение в учреждениях, в которых ведутся исследования

по молекулярной спектроскопии, современным проблемам физики молекул, таких как Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Институт спектроскопии РАН (г. Москва, г. Троицк), Институт прикладной физики РАН (г. Нижний Новгород), Институт оптики атмосферы им. В. Е. Зуева СО РАН (г. Томск), Национальный исследовательский Томский политехнический университет; в учебном процессе Национального исследовательского Томского государственного университета и Национального исследовательского Томского политехнического университета при чтении курсов лекций «Физика атомов и молекул», «Современные проблемы молекулярной спектроскопии».

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

достоверность обеспечивается корректностью постановки задач, использованием апробированных теоретических методов решения и физически обоснованными приближениями;

использованы современные программные среды для разработки алгоритмов и создания вспомогательных тестовых программ на языках MAPLE, FORTRAN;

приведено сравнение полученных значений спектроскопических параметров возбужденных колебательных состояний со значениями параметров основного колебательного состояния, разница между которыми составляет (5–10) %, что соответствует положениям и выводам теории колебательно-вращательной спектроскопии молекул.

выявлено согласие полученных значений параметров, значений колебательно-вращательных энергий с аналогичными результатами других авторов в том случае, когда было возможно сравнение.

Научная новизна исследования заключается в том, что:

получены параметры основных колебательных состояний молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$, позволяющие воспроизводить их экспериментальные комбинационные разности с точностью, в несколько раз превышающей известные в литературе данные; впервые определены значения параметров колебательных состояний g-типа ($\nu_{10}=\nu_7=1$) и ($\nu_{10}=\nu_{12}=1$) посредством анализа «горячих» полос $\nu_{10}+\nu_7-\nu_{10}$ и $\nu_{10}+\nu_{12}-\nu_{10}$ молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$; впервые получены значения параметров 22 колебательных состояний молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ на основе анализа

Фурье-спектров высокого разрешения до максимальных значений квантового числа $J^{\text{макс.}} = 52$; впервые экспериментально определены абсолютные интенсивности спектральных линий поглощения и коэффициентов уширения в полосах ν_9 и ν_{11} молекулы $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$; впервые исследованы 5 запрещенных по симметрии полос молекул $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и $^{13}\text{C}^{12}\text{CH}_4$ за счет учета сильных резонансных взаимодействий с разрешенными колебательно-вращательными полосами.

Личный вклад соискателя состоит в: участии в постановке цели и задач, разработке подхода к интерпретации спектров и получении параметров эффективного гамильтониана, исследовании интенсивностей спектральных линий поглощения, определении параметров эффективного дипольного момента, подготовке публикаций по результатам исследования. Часть экспериментальной регистрации спектров проводилась с участием соискателя.

Диссертация отвечает критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней для диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, и, в соответствии с пунктом 9 Положения, является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи по исследованию спектров молекул типа асимметричного волчка применительно к молекуле $^{12}\text{C}_2\text{H}_4$ и её изотопическим модификациям, имеющей значение для развития колебательно-вращательной спектроскопии молекул.

На заседании 25.10.2018 диссертационный совет принял решение присудить **Аслаповской Ю. С.** учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 4 докторов наук по специальности 01.04.05 – Оптика, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за – 17, против – 1, недействительных бюллетеней – 2.

Заместитель председателя
диссертационного совета



Войцеховский

Александр Васильевич

Учёный секретарь
диссертационного совета

Пойзнер

Борис Николаевич

25.10.2018