

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Зяtkовой Анастасии Георгиевны** «Исследование количественных характеристик поглощения изотопологов диоксида серы и этилена», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика

Диссертационная работа Зяtkовой А.Г. представляет собой теоретическое исследование в области молекулярной спектроскопии и посвящена проблеме корректного извлечения из спектров высокоточной экспериментальной информации о количественных характеристиках поглощения изотопологов диоксида серы и этилена.

Расчет внутримолекулярных потенциальных функций многоатомных молекул, а также решение обратной задачи определения положений или интенсивностей линий являются важными проблемами, решаемыми методами молекулярной спектроскопии. При этом, как показывают практические расчеты, достижение необходимой точности наталкивается на вычислительные трудности. В такой ситуации необходимым является разработка подходов, упрощающих реализацию данных проблем, а также использование информации о спектроскопических параметрах изотопозамещенных модификаций исследуемых молекул. В настоящей работе предложены новые пути решения, озвученных выше вопросов, что говорит об актуальности и важности выполненных исследований.

К наиболее значимым результатам и выводам настоящей диссертационной работы относятся следующие: 1) для молекулы транс- $C_2H_2D_2$ в диапазоне $1350-1950\text{ см}^{-1}$ получены спектроскопические параметры, описывающие систему пяти сильно взаимодействующих колебательных состояний. Точность воспроизведения исходных экспериментальных данных составляет $2,5 \cdot 10^{-4}\text{ см}^{-1}$; 2) разработан алгоритм и создана программа на аналитическом языке программирования MAPLE17, позволяющая производить численные оценки эффективных параметров дипольного момента для ранее не исследованных фундаментальных полос молекул типа-XYZ (C_s симметрии); 3) предложен и реализован новый метод оценки компонентного состава изотопологов диоксида серы. Погрешность в определении значения парциального значения составляет не более, чем 2%; 4) для молекулы $^{34}SO_2$ в районе фундаментальной полосы ν_2 был произведен экспериментальный и теоретический анализ интенсивностей линий. Как следствие, обработано 1500 отдельных линий и получен набор из четырех параметров эффективного дипольного момента; 5) определена энергетическая структура двух ранее неисследованных колебательных состояний (021) и (111). В качестве исходной экспериментальной информации использовались «горячие» переходы полос $\nu_1+\nu_2+\nu_3-\nu_2$ и $2\nu_2+\nu_3-\nu_2$.

Описанные в автореферате исследования имеют достаточно заверченный характер, начиная от общих методов исследования до результатов количественных расчетов спектров конкретных молекул. В подавляющем большинстве полученные автором диссертации результаты являются новыми. Новые результаты в теории подтверждают научную значимость проведенных исследований. Достоверность результатов и выводов не вызывает сомнений.

Считаю, что диссертационная работа Зятьковой А.Г. отвечает требованиям п. 8 Порядка присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете.

Таким образом, излагаемые в автореферате результаты позволяют сделать вывод, что работа Зятьковой А. Г. удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а автор - А.Г. Зятькова заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 - Оптика.

Профессор кафедры прикладной математики
Общеобразовательного факультета ФГБОУ ВО ТГАСУ,
доктор физико-математических наук, с.н.с

Г.А. Онопенко

Подпись _____

« 9 » 09 2019 г.

Подпись Онопенко Г.А. заверяю
Ученый секретарь ФГБОУ ВО ТГАСУ
кандидат технических наук, доцент

Ю.А. Какушкин

Подпись _____

_____ 2019 г.

Сведения:

Полное наименование организации:

Федеральное государственное образовательное учреждение высшего образования
«Томский государственный архитектурно-строительный университет»,

6340003, г. Томск, пл. Соляная, 2

Телефон: 8 (3822) 65-93-58

Эл.адрес: galex_on@mail.ru

Должность: профессор кафедры прикладной математики, д. ф.-м. н.

Ф.И.О.: Онопенко Галина Александровна

Даю согласие на обработку персональных данных _____