

ОТЗЫВ

официального оппонента о диссертации Замотаевой Валерии Александровны «Исследование колебательно-вращательных спектров изотопологов диоксида серы», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Диссертационная работа В. А. Замотаевой посвящена исследованию колебательно-вращательных спектров изотопных модификаций двуокиси серы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$, и $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$.

Актуальность исследования. Молекулярная спектроскопия высокого разрешения является важнейшим источником информации о внутримолекулярной динамике, структуре и силах взаимодействия, процессах, происходящих при столкновениях молекул в газовой среде. Исследование спектров изотопических модификаций молекул, в частности, диоксида серы, кроме получения спектроскопической информации о этих модификациях, позволяет также дополнить недостающую информацию об исходной («основной») молекуле.

Задачей рассматриваемой диссертационной работы являются также разработка теоретических моделей, способных воспроизводить экспериментальные спектры изотопических модификаций молекулы диоксида серы на высоком уровне точности, сравнимом с точностью измерений. Поэтому тема и цели диссертации Замотаевой В.А. являются, без сомнения, актуальными.

Содержание работы. Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка используемой литературы. Объём и структура работы удовлетворяют установленным требованиям для кандидатских диссертаций.

Во введении заявлен предмет исследований, обоснована актуальность работы, приводится обзор имеющейся литературы, сформулированы цели и задачи исследования, положения, выносимые на защиту, научная ценность, новизна и достоверность результатов.

Первая глава диссертации носит обзорный характер. Здесь рассмотрены основные понятия, методы и приближения, используемые в теории колебательно-вращательных спектров молекул. Обзор достаточно полный и правильно отражает достигнутый в настоящее время уровень теоретических исследований.

Вторая и третья главы всецело посвящены результатам интерпретации Фурье-спектров трёх симметрично-замещённых модификаций $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ и несимметрично-замещённой модификации $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$.

В четвёртой главе приведены результаты решения обратной задачи по определению параметров функции внутримолекулярной потенциальной энергии. При решении этой задачи использованы все доступные данные о колебательных центрах, а также часть информации о колебательно-вращательных энергиях возбуждённых состояний.

В общей сложности, в диссертации для молекулы двуокиси серы и её изотопологов было проинтерпретировано более 38000 переходов, большая часть из которых была обнаружена впервые. Для изотопной модификации $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$, для основного колебательного состояния решена обратная задача, определены вращательные и центробежные постоянные. Также, в рамках метода эффективного вращательного гамильтониана, определены параметры 15 возбуждённых колебательно-вращательных состояний. Для полосы ν_2 основной модификации определены интенсивности линий поглощения, параметры эффективного дипольного момента, полуширины линий, коэффициенты уширения линий давлением. Получены значения параметров потенциала диоксида серы на основе высокоточной информации о ее четырёх изотопологах.

Основные результаты работы, соответствующие заявленным целям и задачам исследования, представлены в заключении.

Научная значимость и практическая ценность работы. Выполненные исследования Фурье – спектров высокого разрешения молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ и $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ дают более полное представление о структуре колебательно – вращательного энергетического спектра изотопных модификаций двуокиси серы, чем это известно на настоящее время. Разработанные автором теоретические модели позволяют рассчитать спектры поглощения, излучения и рассеяния в широком спектральном диапазоне, для слабых линий, не наблюдаемых в эксперименте. Полученные в диссертации Замотаевой В.А. новые спектроскопические данные, несомненно, представляют большой практический интерес, в частности, для пополнения банков данных HITRAN и GEISA. Эта информация также необходима для верификации и коррекции результатов *ab initio* расчётов структуры молекулы, поверхностей потенциальной энергии и дипольного момента SO_2 .

Достоверность полученных результатов и выводов основывается, в первую очередь, на применении хорошо установленных и проверенных теоретических моделей. При решении обратных спектроскопических задач применяемые модели включали все

необходимые эффекты и резонансные взаимодействия, что позволило поределивать физически корректные наборы спектроскопических параметров, позволяющих теоретически описывать колебательно-вращательные переходы с погрешностью, сравнимой с экспериментальной. Публикация основных результатов диссертационной работы в международных научных журналах с традиционно строгим порядком реферирования материалов, также служит подтверждением достоверности результатов и выводов.

Научная новизна результатов диссертации состоит в проведении анализа спектров поглощения высокого разрешения в ряде спектральных диапазонов, которые не были изучены до настоящего момента, и их обработке с помощью достаточно строгих теоретических моделей. В диссертации получен обширный массив новых прецизионных спектроскопических параметров, потенциально имеющих широкое поле приложений.

Основные результаты диссертации опубликованы в рецензируемых изданиях: три статьи в отечественных журналах из списка ВАК, четыре статьи в зарубежных журналах с высоким рейтингом; полученные результаты были представлены на восьми международных конференциях.

Личный вклад автора заключался в непосредственном проведении анализа всех зарегистрированных спектров, идентификации линий в спектрах, решении обратных задач, анализе резонансных взаимодействий и численных расчётов параметров моделей.

Замечания по содержанию и оформлению работы:

1) В заключительной четвертой главе автор описывает процедуру восстановления функции потенциальной энергии SO_2 . Текст этой главы читается с трудом, невозможно понять, в каком виде представляется молекулярный гамильтониан и как вычисляются колебательные уровни энергии.

2) Первое защищаемое положение сформулировано неудовлетворительно, не указано, что означают индексы i и j .

3) В тексте имеются не исправленные ошибки и неточности. Например, на стр. 61 приведена формула (2.10) для «силы линии». В действительности это соотношение для коэффициента поглощения. В этой же формуле используется десятичный логарифм, что является ошибкой – в этом соотношении необходимо использовать натуральный логарифм. На стр. 64-65 указывается, что проводилась «весовая подгонка» и в исходные данные включались также высокоточные микроволновые данные. При этом непонятно, как выбирались веса. На стр. 72 указано, что параметры эффективного дипольного момента определялись в результате «мультиспектральной весовой подгонки». В

действительности процедура определения параметров эффективного дипольного момента не предполагает использования мультиспектральности.

Приведенные недостатки не снижают общей положительной оценки диссертационной работы. Тема исследования соответствует заявленной научной специальности. Диссертационная работа Замотаевой В. А. выполнена на высоком научном уровне и содержит новые результаты необходимые для различных приложений. Автореферат правильно и полностью отражает содержание диссертации.

Заключение. Считаю, что в диссертационной работе Замотаевой Валерии Александровны «Исследование колебательно-вращательных спектров изотопологов диоксида серы» представлено решение актуальной научной задачи, она содержит новые результаты, имеющие существенное научное значение. Диссертационная работа соответствует требованиям п.8 «Порядка присуждения учёных степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете», утвержденного приказом ФГАОУ ВО НИ ТПУ от 6 декабря 2018 г. № 93/од в редакции приказа от 28 августа 2019 г. № 66. Автор диссертационной работы, Замотаева Валерия Александровна, заслуживает присуждения учёной 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 учреждения науки Институт оптики атмосферы им. В. Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук.



Быков Александр Дмитриевич

634055, Россия, Томск, площадь Академика Зуева, 1.

Тел. (3822)492738, Факс (3822)492085

e-mail adbykov@rambler.ru

Подпись А. Д. Быкова заверяю:

Учёный секретарь ИОА СО РАН,

к.ф.-м.н.



Тихомирова Ольга Владимировна

Дата: « 20 » ноября 2019 г.

