

ОТЗЫВ

дополнительного члена диссертационного совета ДС.ТПУ.02 на диссертацию **Зятыковой Анастасии Георгиевны** «Исследование количественных характеристик поглощения изотопологов диоксида серы и этилена», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика

Актуальность темы диссертационной работы

Диссертационная работа направлена на решение проблем извлечения количественной информации о характеристиках молекул из колебательно-вращательных спектров в инфракрасном диапазоне. Исследование поглощения спектров типа асимметричного волчка играет значимую роль в определении фундаментальных характеристик многоатомных молекул, например представленных в работе изотопологов диоксида серы и этилена. Исследования изотопологов с различными конфигурациями замещения позволяет получить информацию о «запрещенных» по симметрии колебательных состояниях основной модификации молекулы. Задача извлечения все более полной и точной информации из молекулярных спектров делает продолжение разработки теоретических методов, позволяющих с высокой точностью предсказывать положения и интенсивности спектральных линий в широких областях шкалы длин волн. Также важны предложенные методы определения парциального давления.

Общая методология и методика исследования, выбранные для диссертационной работы, соответствуют современному уровню науки и техники. Используемые подходы к решению поставленных задач научно обоснованы и соответствуют современному мировому уровню исследований в области теории колебательно-вращательных спектров.

Анализ характеристик поглощения колебательно-вращательных спектров изотопологов этилена и диоксида серы выполнялись с применением следующих методов: теории изотопозамещения, операторной теории возмущений, теории групп, метода комбинационных разностей, методов Фурье-спектроскопии. При создании программного обеспечения для решения поставленных задач применялись языки программирования FORTRAN, MAPLE и MATHEMATICA, а также использовались процедуры и методы численного решения квантовых задач.

Диссертация представлена на 149 страницах, включая 29 таблиц и 19 рисунков, а также библиография, состоящая из 117 наименований.

Целью диссертационной работы является экспериментальное и теоретическое исследование количественных характеристик колебательно-вращательных спектров

молекул типа асимметричного волчка на примере изотопически замещенных молекул этилена и диоксида серы.

Поставленные задачи полностью соответствуют заявленной цели диссертационного исследования, а полнота и корректность их постановки в сочетании с методологической реализацией позволили Зятьковой А.Г. решить поставленные задачи.

Во **введении** обоснована актуальность темы исследования, сформулированы цели и задачи работы, положения, выносимые на защиту, пункты научной ценности, новизны и достоверности полученных результатов, изложена структура диссертации. Представлены сведения о публикации и апробации полученных результатов.

Первая глава диссертации содержит в себе теоретические основы исследования спектров многоатомных молекул типа асимметричного волчка. Обсуждаются причины уширения спектральных линий, проведен обзор текущего состояния исследований контуров спектральных линий.

Во **второй главе** объектом исследования является Фурье-спектр молекулы транс- $C_2H_2D_2$ в диапазоне $1350-1950\text{ см}^{-1}$. С учетом описанного в первой главе метода эффективных гамильтонианов, подробно описан процесс построения теоретической модели задачи. Для решения обратной задачи, вращательные параметры, центры полос, а также параметры резонансного взаимодействия Кориолиса оценены теоретически и использовались в качестве стартовой точки при варьировании задачи. Результат анализа спектра представлен в виде таблиц со спектроскопическими параметрами диагональных и резонансных блоков, а также рисунков, иллюстрирующих корректность полученных данных по каждому колебательному состоянию в отдельности.

В **третьей главе** представлен алгоритм и результаты количественного определения параметров эффективного дипольного момента молекул типа XYZ (симметрии C_s), на примере изотополога диоксида серы $^{32}S^{18}O^{16}O$. Теория изотопозамещения, а также операторная теория возмущений являются основными математическими инструментами, необходимыми для реализации цели данного раздела. Изотопические соотношения для параметров дипольного момента молекул типа XY_2 и XYZ позволили численно оценить значения ранее экспериментально неисследованных параметров дипольного момента фундаментальных полос молекул $^{32}S^{16}O_2$, $^{34}S^{16}O_2$ и $^{32}S^{18}O^{16}O$. Параметры эффективного дипольного момента для молекулы $^{32}S^{18}O^{16}O$ получены впервые.

Четвертая глава несет в себе новую спектроскопическую информацию, извлеченную из спектров высокого разрешения молекул $^{32}S^{16}O^{18}O$ и $^{34}S^{16}O_2$. В разделах 4.1. - 4.3 подробно рассмотрен алгоритм предложенного в диссертационной работе метода определения парциального давления изотопологов диоксида серы в газовой смеси.

Реализация данного подхода выполнена на примере фундаментальной полосы ν_2 молекулы $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$. Знание парциального давления позволило успешно выполнить анализ интенсивностей отдельных спектральных линий в спектре исследуемого колебательного состояния и впервые получить набор эффективных параметров дипольного момента для колебательного состояния (010).

В разделе 4.4 приводится информация об исследовании слабых переходов в «горячих» полосах $\nu_1+\nu_2+\nu_3-\nu_2$ и $2\nu_2+\nu_3-\nu_2$ в спектре молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. В качестве результатов успешно выполненного исследования, приводятся таблицы с параметрами, а также смоделированные спектры полос $\nu_1+\nu_2+\nu_3-\nu_2$ и $2\nu_2+\nu_3-\nu_2$ на основе полученного набора параметров.

В заключении приведены обобщающие выводы по результатам экспериментальных и теоретических исследований, которые подтверждают решение поставленных задач и достижение цели диссертационной работы.

Диссертационная работа является результатом исследований, выполненных автором самостоятельно, либо с непосредственным участием или под руководством соискателя с привлечением коллег из Технического университета Брауншвейга (Германия).

Соответствие диссертации и автореферата паспорту специальности 01.04.05 – Оптика

Материалы диссертации и автореферата соответствуют пунктам 3, 4 и 5 паспорта научной специальности 01.04.05 – Оптика.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций

Вынесенные на защиту положения обоснованы на представленных результатами. Экспериментальные данные получены с использованием современного оборудования. Выявленные закономерности подтверждены в работе экспериментальными данными, которые не противоречат основным теоретическим положениям, показано их хорошая согласованность с опубликованными данными других исследователей. Основные выводы по диссертации отражают обобщение результатов проведенных исследований.

Новизна диссертационной работы заключается в следующем:

1. Для дважды дейтерированного изотополога этилена (транс- $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$) в спектральном диапазоне $1350\text{--}1950\text{ см}^{-1}$ впервые исследована система пяти сильно взаимодействующих состояний. Для полосы $\nu_7+\nu_8$ зарегистрированный спектр с высоким разрешением позволил определить переходы b -типа, а для полос $\nu_8+\nu_{10}$ и $\nu_6+\nu_7$ – переходы d -типа, проявляющиеся из-за резонанса;
2. Впервые выполнен теоретический анализ параметров в разложении эффективного дипольного момента молекул типа-XYZ (C_s симметрии). Это, в свою очередь,

позволило впервые выполнить численный анализ параметров эффективного дипольного момента фундаментальных колебательных состояний молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$;

3. Разработан и апробирован новый метод оценки парциального давления изотопологов диоксида серы с высокой точностью (на уровне 1-2%);
4. Для колебательного состояния (010) молекулы $^{34}\text{SO}_2$ с точностью 4,5% впервые получен набор параметров эффективного дипольного момента, позволяющий воспроизводить и предсказывать абсолютные интенсивности отдельно стоящих линий в спектре;
5. Впервые исследование «горячих» переходов позволило исследовать энергетическую структуру слабых трижды возбужденных колебательных состояний (021) и (111).

Значение выводов и рекомендаций, полученных в диссертации, для науки и практики.

Проведенные экспериментальные и теоретические исследования могут служить источником ценной информации, которая позволяет предсказывать положения и интенсивность линий в ранее не исследованных спектральных диапазонах молекул транс- $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$, $^{34}\text{SO}_2$ и $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. Разработанные в процессе выполнения работы модели и методы, результаты применения развитых методов и моделей к исследованию реальных объектов позволяют получить количественную информацию о параметрах спектральных линий и фундаментальных характеристиках различного рода молекул, которая является необходимой при исследовании более сложных эффектов внутримолекулярной природы, оптических и физико-химических свойств молекул, является важной для пополнения баз данных и банков спектроскопической информации, используемой в астрофизике, газоанализе, атмосферной оптике и т.д.

Основные результаты исследования опубликованы в рецензируемых российских и зарубежных научных изданиях. Материалы диссертации и полученные результаты были представлены и обсуждались на различных международных и всероссийских научных конференциях и коллоквиумах, донесены до независимых исследователей. По результатам диссертационных исследований опубликовано 20 работ, в том числе 6 статей в журналах из списка ВАК, 3 статьи в зарубежных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus, а также 11 трудов как всероссийских, так и международных конференций и коллоквиумов.

Замечания по диссертации:

1. Теоретические основы работы описаны на очень высоком уровне. Однако контекст работы требует доработки. А именно, как могут разработанные методы улучшить понимание, например, этилена как гормон роста, созревания и старения? Действительно ли этот метод применим в биологических средах, а не газовых? Достижимо ли представленное в работе экспериментальное разрешение в спектроскопии атмосферы планет? Не хватает сравнения с другими теоретическими подходами (используемые приближения и их влияние на результат).
2. К формуле (1.2) дана неполная расшифровка символов: указан символ скорости света, который не используется в (1.2), но не приведен символ h .
3. На странице 38 указано, что задаются уравнения системы поворота для совмещения двух систем координат («материнской молекулы» и изотополога). Почему эта система описывает только поворот а не смещение?
4. В целом уровень оформления и формулировки текста диссертации находится на очень высоком уровне. Однако, есть несколько небольших неточностей и опечаток (стр. 48 – результаты озвучены в главе, более верным будет использовать результаты описаны; на Рис. 2.1 в легенде используется символ «-» перед значениями давления, который легко спутать с минусом; стр. 69 – исследованных вместо исследуемых).

Заключение

Указанные замечания не снижают высокую оценку качества и объема проведенного исследования, а отмеченные недостатки не касаются защищаемых положений.

Автореферат полностью отражает содержание, основные результаты и выводы диссертационной работы. Результаты диссертации хорошо апробированы.

Представленные в работе основные результаты исследования достоверны, выводы и рекомендации обоснованы. Работа выполнена на высоком теоретическом, экспериментальном и профессиональном уровне. В диссертации соблюдаются принципы соответствия поставленной цели, задачи исследования и полученных результатов исследования.

Считаю, что диссертационная работа Зяtkовой А.Г. отвечает требованиям п. 8 Порядка присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете (Приказ №93/од от 06.12.2018).

Диссертационная работа «Исследование количественных характеристик поглощения изотопологов диоксида серы и этилена» является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на актуальную тему и содержащей значимые научные и

практические результаты, а ее автор - А.Г. Зятькова заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 - Оптика.

Дополнительный член диссертационного
совета ДС.ТПУ.02

профессор ИШФВП ФГАОУ ВО
«Национальный исследовательский
Томский политехнический университет»,
Ph.D по экспериментальной физике

Подпись Шерemet Е.С. заверяю:
ученый секретарь Ученого совета ТПУ
Сведения:

Полное наименование организации:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

Юридический адрес: г. Томск, проспект Ленина, дом 30.

Телефон: 8 (3822) 60-61-64

Эл.адрес: esheremet@tpu.ru

Должность: профессор ИШФВП

Ф.И.О.: Шерemet Евгения Сергеевна

Даю согласие на обработку персональных данных _____

Шерemet
Евгения Сергеевна

Подпись _____

Дата 11.09.2019



СБРАЗОВА
АБРАЗОВА
ФГАОУ ВО «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
О.А. Ананьева