

ОТЗЫВ

дополнительного члена диссертационного совета ДС.ТПУ.02 на диссертацию **Замотаевой Валерии Александровны** «Исследование колебательно-вращательных спектров изотопологов диоксида серы», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

Диссертационная работа Замотаевой В. А. посвящена исследованию колебательно-вращательных спектров высокого разрешения молекулы диоксида серы и её изотопологов с целью их идентификации, извлечения информации об энергетических характеристиках рассматриваемых молекул и последующего использования полученных результатов в задачах определения внутримолекулярной потенциальной функции исследуемых молекул.

Актуальность темы диссертационной работы.

Многие десятилетия, и в настоящее время, инфракрасная молекулярная спектроскопия представляет собой незаменимый инструмент для изучения молекулярной структуры и решения связанных с этим проблем, таких как идентификация неизвестных веществ, выяснение их структурных особенностей, изучение межмолекулярных взаимодействий и комплексообразования, а также количественный анализ индивидуальных веществ и их смесей.

Своеобразной особенностью исследований, представленных в диссертационной работе Замотаевой В. А., является её нацеленность на изучение колебательно-вращательных спектров поглощения высокой точности. Следует отметить, что центры линий в изучаемых инфракрасных спектрах идентифицируются с точностью около нескольких десятитысячных долей процента, а интенсивности наиболее сильных линий – до нескольких процентов. Несомненно, что данные, полученные из анализа колебательно-вращательных состояний диоксида серы и его изотопических модификаций, содержат уникальную информацию о структурных параметрах молекулы и её изотопологов. В свою очередь, многие проблемы, в том числе перечисленные выше, возникающие в теории колебательно-вращательной спектроскопии, могли бы быть решены, а некоторые даже потеряли бы смысл, при наличии высокоточной информации о внутримолекулярной потенциальной функции молекулы. В связи с вышеизложенным, возникает практическая необходимость в проведении тщательного анализа тонкой структуры спектров диоксида серы и его изотопологов, значительная часть которых не изучалась до настоящего момента. Таким образом, становится понятен всё возрастающий в последние годы интерес к численному определению параметров потенциальных функций молекул.

Всё вышесказанное говорит об актуальности поставленной цели и задач, решаемых в диссертационной работе Замотаевой В. А.

Содержание работы.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы.

В первой главе приводится необходимый литературный обзор. В целом, в этой части диссертации дается достаточно полный обзор теоретических методов, применяемых для анализа спектров.

Вторая глава диссертации содержит результаты анализа спектров высокого разрешения молекулы диоксида серы и трёх её изотопических модификаций – $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ в широком спектральном диапазоне от 350 до 2700 см^{-1} . Идентификация линий проведена на основе метода комбинационных разностей, полученные уровни энергии нескольких резонансных полиад использованы для построения теоретической модели, описывающей энергетический спектр с высокой точностью. Теоретическая модель построена на основе «глобального» описания спектра, что представляется существенным шагом в описании колебательно-вращательного спектра молекулы диоксида серы.

В третьей главе диссертации представлены результаты анализа спектров поглощения редкого изотополога диоксида серы – $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ в спектральном диапазоне от 1040 до 2700 см^{-1} . Проведено детальное исследование спектров, представлена идентификация линий, уровни энергии, вращательные и центробежные постоянные, изучены некоторые резонансные взаимодействия.

Четвертая глава содержит результаты анализа количественных данных параметров внутримолекулярной потенциальной функции (ВПФ) в естественных координатах для молекулы диоксида серы на основе использования высокоточной информации об изотопологах $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$, как имеющейся в литературе, так и полученной в рамках данной работы.

В Заключении приводятся основные результаты и выводы работы.

Оценивая диссертационную работу Замотаевой В. А., считаю необходимым отметить следующее.

1) Научная значимость и практическая ценность.

Во-первых, в работе, при анализе спектров высокого разрешения, получен большой объём новых высокоточных данных о колебательно-вращательном энергетическом спектре молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. Эти новые данные могут быть

использованы для решения различных задач, например, для расчетов спектров излучения или рассеяния, вычисления термодинамических функций указанных молекул.

Во-вторых, в диссертации представлены теоретические модели, основанные на методе эффективных гамильтонианов и идее «глобального» описания спектров. Разработанные модели и полученные наборы спектроскопических параметров позволяют воспроизвести экспериментальные спектры с точностью, близкой к точности измерений. Данные результаты могут быть использованы в дальнейшем для количественных исследований вероятностей переходов, расчетов коэффициентов уширения и сдвига линий и решения других задач, требующих использования уровней энергии и волновых функций колебательно-вращательных состояний молекул.

В-третьих, зарегистрированы инфракрасные Фурье-спектры изотопологов диоксида серы в диапазоне фундаментальных, горячих, комбинационных и обертоновых полос. Проведенный анализ позволил идентифицировать переходы, принадлежащие ранее не исследованным колебательно-вращательным полосам.

В-четвертых, в диссертации, на основе результатов анализа спектров проведено определение функции потенциальной энергии молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$.

2) Степень обоснованности и достоверности заключений, научных положений, выводов и рекомендаций.

Достоверность полученных результатов подтверждается как точным комбинационным правилом, так и детальными расчетами – методом эффективных гамильтонианов. Достоверность теоретических подходов обусловлена использованием квантово-механических моделей, основанных на первых принципах, а также минимальному числу упрощений, необходимых для воспроизведения экспериментальных данных. Некоторая часть полученных результатов уточняет ранее известные результаты, и не противоречит им. Положения, выносимые на защиту, обоснованы в выводах по разделам диссертационной работы.

По результатам диссертационных исследований опубликовано 15 работ, в том числе 3 статьи в журналах из списка ВАК, 4 статьи в зарубежных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus, а также 8 трудов международных конференций и коллоквиумов.

3) Научная новизна результатов является очевидной, поскольку автор исследовала впервые измеренные спектры $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ в ряде спектральных диапазонов и впервые определила высокоточные спектроскопические и молекулярные постоянные указанных молекул.

4) Соответствие диссертации и автореферата паспорту специальности.

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

Замечания по диссертации.

1. Одной из задач работы являлось исследование структуры колебательно-вращательных состояний молекулы SO_2 «...с точностями не хуже экспериментальных погрешностей...» (стр. 9 диссертации). Однако в заключении работы не обсуждается, насколько успешно удалось решить эту задачу.
2. Результаты, представленные на рис. 2.9 диссертации (рис. 3 автореферата) недостаточно подробно описаны и на графиках не указаны доверительные интервалы.
3. При исследовании спектров молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$ использовалась калибровка «... на основании спектральных линий соединений H_2O и CO_2 , которые были включены в исследуемый образец.» (Стр. 63 строки 7-9). К сожалению, в тексте диссертации не определено, что калибровалось? В связи с этим возникает вопрос о возможности определения количественного содержания исследуемых молекул в пробе, их концентрации. Этот вопрос практической направленности не обсуждается в работе.
4. Некоторые формулировки в тексте автореферата и диссертации недостаточно точны. Например, утверждение автора «...становится возможным говорить о влиянии отклонения от приближения Борна-Оппенгеймера на структурные параметры молекулы (стр. 4 диссертации, строки 10-11 сверху) представляется неверным.
5. В тексте диссертации и автореферата имеется ряд стилистических погрешностей: стр.10 автореферата строка 8 сверху и строка 8 снизу, стр.13 автореферата строка 3 сверху, стр. 15 автореферата строка 12 сверху и др. Используется и просторечие: «Что касается...» (стр.41 диссертации 5 строка снизу; стр. 13 автореферата 10 строка снизу)

Однако, указанные замечания не влияют на высокий уровень работы и несущественны для положительной оценки работы, которую можно считать выполненной на высоком теоретическом, экспериментальном и профессиональном уровне. Автореферат диссертации отражает в полной мере содержание диссертации и дает представление о полноте и глубине проведенных научных изысканий диссертанта. Благодаря системному подходу, полученные Замотаевой В. А. результаты имеют высокую научную и практическую ценность. Работа диссертанта является законченным научным исследованием.

Считаю, что диссертационная работа Замотаевой Валерии Александровны «Исследование колебательно-вращательных спектров изотопологов диоксида серы»

полностью удовлетворяет 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, а диссертант, Замотаева Валерия Александровна, заслуживает присуждения ученой 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», доктор
физико-математических наук

Пичугин
Владимир Фёдорович

Подпись

Дата 25.12.2019

Подпись Пичугина В. Ф. заверяю:
учёный секретарь Учёного 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: pichugin@tpu.ru

Должность: профессор ИШФВП

Ф.И.О. Пичугин Владимир Фёдорович

Даю согласие на обработку персональных данных



О. А. Ананьева

(Handwritten signature)