

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.*

В диссертации Замотаевой В. А. представлены результаты теоретического исследования спектров высокого разрешения диоксида серы и его трёх изотопических модификаций в обширной спектральной области.

Актуальность. Исследование колебательно - вращательных спектров представляет важнейшую область физики молекул, необходимую для приложений астрофизике, атмосферной оптике, лазерной физике и многих других разделах науки. Анализ измеренных спектров в газовой форме, определение центров спектральных линий и их интенсивностей, коэффициентов уширения и сдвига давлением, позволяют получить уникальную информацию о строении молекул, внутренней динамике и силах межмолекулярного взаимодействия. В диссертации В. А. Замотаевой рассмотрены, а также предложены пути решения актуальных проблем современной молекулярной спектроскопии, такие как, корреляция параметров гамильтониана при решении обратной спектроскопической задачи, сложность анализа очень слабых спектров «горячих» и комбинационных полос, а также определение параметров внутримолекулярной потенциальной функции, на примере спектров поглощения молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. Исходя из сказанного, выбор темы работы в плане её актуальности представляется вполне оправданным.

Практическая значимость результатов заключается, прежде всего в том, что 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 молекул типа XY_2 и XYZ , 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.

Достоверность результатов и выводов диссертационной работы обеспечивается строгостью используемых моделей и математических методов, непротиворечивостью

результатов и выводов, их согласованностью с современными представлениями теоретической колебательно - вращательной спектроскопии и результатами других авторов, а также подтверждается согласием с результатами соответствующих экспериментальных исследований.

Научная новизна. Выполнен теоретический анализ в общей сложности для 17 впервые зарегистрированных с высоким разрешением колебательно - вращательных полос (более 38000 линий поглощения, зарегистрированных с точностями в центрах поглощения на уровне $1\text{-}5 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$) молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ и $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. Выполнен совместный анализ всех известных на настоящий момент экспериментальных данных для молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ и $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$, имеющий, с одной стороны, самостоятельное важное значение для дальнейшего развития спектроскопии и, с другой стороны, создавший основу для количественного определения параметров ВМПФ молекулы диоксида серы.

Основное содержание работы. Работа состоит из введения, четырёх глав, заключения общим объёмом 183 страницы, содержит список цитируемой литературы из 104 наименований. Основное содержание диссертации опубликовано в 15 печатных работах (из них 7 статей в международных и русских реферируемых периодических изданиях, соответствующих перечню ВАК для кандидатских диссертаций и 8 тезисов международных конференций).

Во **введении** обоснована актуальность темы, кратко изложены предмет исследований и структура диссертации, сформулированы цели работы, защищаемые положения, научная и практическая значимость работы.

Первая глава диссертации посвящена описанию необходимых для понимания оригинальной части работы принципов и некоторых методов колебательно – вращательной теории, включающих краткое описание способа построения корректного квантово–механического гамильтониана в нормальных координатах для трёхатомной молекулы; сведения из теории групп и теории изотопозамещения; приближение Борна-Оппенгеймера и т. д.

Вторая и третья главы диссертации посвящены рассмотрению особенностей тонкой вращательной структуры колебательных спектров молекул типа ассиметричного волчка, на примере молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ и $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. А именно, на основе колебательно – вращательной информации идентифицированной из интерпретации спектров была решена обратная спектроскопическая задача для полиад взаимодействующих состояний вышеперечисленных молекул. Также для молекулы $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ были улучшены параметры основного колебательного состояния. В свою очередь,

особенностью проведённых расчётов является то, что автор использовала экстраполяционные расчёты центробежных постоянных, исходя из их значений для нижних колебательных состояний. Это позволило, зафиксировав эти параметры в процессе решения обратной спектроскопической задачи, более точно определить резонансные операторы.

В заключительной, **четвёртой главе**, полученные высокоточные данные обо всех изотопологах диоксида серы были использованы для коррекции параметров внутримолекулярной потенциальной функции молекулы диоксида серы.

В **заключении** сформулированы основные выводы и результаты проведённых исследований.

Соответствие диссертации и автореферата паспорту специальности 01.04.05 – Оптика.

Тема и содержание диссертации соответствуют областям исследования, указанным в паспорте специальности 01.04.05 – Оптика.

Замечания по диссертационной работе:

1. Таблица 2.6: сравнение результатов, полученных автором, проводится с более чем 20-летней версией базы данных HITRAN-1996. С чем это связано? Возможно эта версия HITRAN лучше и точнее чем 5 последующих?

2. С чем связано весьма ограниченное представление полученных результатов в виде таблиц (представляется, что практически каждая таблица содержит 5, максимум 10 процентов полученной информации)? Это, конечно, разумно для публикаций статей, ввиду, как правило, ограниченности объема статей, но для диссертации – это является недостатком. Можно было бы вынести результаты в приложения.

3. Названия некоторых таблиц и рисунков не соответствуют их содержанию (см., например, таблица 2.10, Рис. 3.6 и т.д.).

4. Непонятно почему и в тексте, и в таблицах, и в подписях к рисункам присутствуют многочисленные надписи и пояснения на английском языке (например, E^{calc} , d_{rms} , и множество других)?

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

Результаты диссертации хорошо апробированы. Автореферат в полной мере отображает содержание, основные результаты и выводы диссертационной работы.

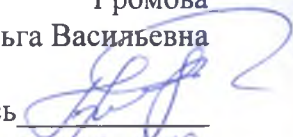
В диссертации соблюдаются принципы соответствия поставленной цели, задачи исследования и полученных результатов исследования. Представленные в работе

основные результаты исследования достоверны, выводы и рекомендации обоснованы. Работа выполнена на высоком научном уровне.

Заключение. Диссертационная работа «Исследование колебательно-вращательных спектров изотопологов диоксида серы» является законченным квалификационным научным исследованием и по содержанию полностью 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 диссертации, Замотаева Валерия Александровна, заслуживает присуждения ей учёной 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
специальности Физика

Громова
Ольга Васильевна

Подпись 
Дата 03.12.2019

Подпись Громовой О. В. заверяю:
учёный секретарь Учёного совета ТПУ



 О. А. Ананьева

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: olgerda@tpu.ru

Должность: профессор ИШФВП

Ф.И.О. Громова Ольга Васильевна

Даю согласие на обработку персональных данных 