

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Замотаевой Валерии Александровны «Исследование колебательно-вращательных спектров изотопологов диоксида серы», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

Диссертационная работа соискателя посвящена **актуальной** теме колебательно-вращательной спектроскопии, связанной с разработкой методов извлечения высокоточной информации о фундаментальных характеристиках молекул: их строении, внутримолекулярных силах, динамике колебаний и вращений. Информация о спектроскопических характеристиках молекул необходима также для широкого круга приложений в атмосферной оптике, лазерной физике, газоанализе. Исчерпывающие сведения о молекулах можно получить, например, решив соответствующее уравнение Шредингера. К сожалению, в настоящее время решить полное электронно-колебательно-вращательное уравнение Шредингера для многоатомной молекулы не представляется возможным. При таких условиях понятен интерес к количественному определению параметров потенциальных функций молекул из экспериментальных данных, которые, как известно, характеризуют их внутреннюю динамику. Однако, зачастую, информации о параметрах потенциальной функции «материнской» молекулы оказывается недостаточно. Источником дополнительной информации в таких случаях являются спектры изотопозамещённых модификаций, чьи физические и химические свойства тесно связаны со свойствами исходной молекулы, а спектры, в то же время, могут различаться очень сильно. Вместе с тем, в приближении Борна-Оппенгеймера потенциальная функция молекулы остаётся неизменной при любой изотопической замене атомов. Это позволяет использовать данные, полученные при анализе различных изотопологов.

Большая часть диссертационной работы Замотаевой В. А. посвящена анализу колебательно-вращательных спектров высокого разрешения изотопических модификаций диоксида серы. Необходимо отметить, до проведения настоящего исследования в литературе имела информация лишь об основных колебательных состояниях изотопологов $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ и $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$, которые были найдены из МВ переходов, и несколько МВ переходов наблюдались для фундаментальных полос ν_1 , ν_3 , и ν_2 , в ИК области систематические исследования спектров данных изотопологов не проводились.

В рамках настоящего исследования был проделан большой объём работы. В частности, в области фундаментальной полосы ν_2 основной изотопической модификации были определены параметры спектральных линий (интенсивности, положения линий, коэффициенты уширения), на этой основе были получены значения параметров эффективного дипольного момента. В результате проведённого анализа для молекул диоксида серы и трёх её изотопических модификаций было идентифицировано около 38000 колебательно-вращательных переходов, принадлежащих семнадцати возбуждённым колебательным состояниям. Для пятнадцати из них, включая сверхслабые, была решена обратная спектроскопическая задача. Далее полученные высокоточные данные изотопологов диоксида серы были использованы для коррекции параметров внутримолекулярного потенциала.

Следует отметить следующие, наиболее интересные на мой взгляд, **новые научные результаты**:

- получен обширный новый экспериментальный материал по параметрам спектральных линий (полуширины, интенсивности, центры) изотопологов диоксида

серы, с помощью которого были найдены с высокой точностью спектроскопические параметры для пятнадцати колебательно-вращательных состояний, что позволило идентифицировать около 40 тысяч КВ переходов.

- с помощью новых современных данных построена более корректная потенциальная функция для молекулы двуокиси серы.

Работа Замотаевой В. А. представляет существенный вклад в исследование спектров поглощения в инфракрасной области молекулы диоксида серы и её изотопологов. Результаты проведённого исследования имеют практическое значение и могут быть использованы для решения различных задач оптики и физической химии. Материал, представленный в автореферате, свидетельствует о том, что диссертация написана на высоком научном уровне. Полученные результаты достаточно полно опубликованы в международных и отечественных научных журналах: "Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer", "Известия ВУЗОВ: Физика" (переводное издание "Russian Physics Journal"), "Оптика атмосферы и океанов" и др., апробированы на различных международных коллоквиумах и конференциях по молекулярной спектроскопии.

Считаю, что диссертация Замотаевой Валерии Александровны представляет собой законченное научное исследование и отвечает 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, Замотаева Валерия Александровна, заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

Заведующий кафедрой оптики и спектроскопии НИ ТГУ, доцент,
доктор физико-математических наук
по специальности 01.04.05 – оптика.

Черепанов Виктор Николаевич

Подпись

Дата 8.12.2019

Подпись Черепанова В. Н. заверяю:

ПОДПИСЬ УДОСТОВЕРЯЮ
Ведущий документовед
управления делами
Ч.Г. Михеев

Сведения:

Полное наименование организации:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», Российская Федерация, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36,

Адрес места работы:

634050, г. Томск, пл. Новособорная 1, офис 226,

Томский государственный университет,

Физический факультет,

телефон: +7 (3822) 529-651, E-mail: dean@phys.tsu.ru

(+7 (3822) 529-640, e-mail: vnch@phys.tsu.ru)

Даю согласие на обработку персональных данных ____