



УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по научной работе и  
инновациям ФГАОУ ВО НИ ТПУ  
Степанов И.Б.

« 29 » / 04 2019 г.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного автономного образовательного учреждения  
высшего образования «Национальный исследовательский Томский  
политехнический университет»

Диссертация «Исследование количественных характеристик поглощения изотопологов диоксида серы и этилена» выполнена в Исследовательской школе физики высокоэнергетических процессов Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

В период подготовки диссертации соискатель Зятькова Анастасия Георгиевна обучалась в очной аспирантуре по специальности 01.04.05 «Оптика» и работала в качестве ассистента в отделении Естественных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

В 2015 г. окончила Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» по направлению подготовки «Физика» (квалификация «Магистр», диплом с отличием).

Справка об обучении в аспирантуре и справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в 2019 г. Федеральным государственным автономным образовательным учреждением высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

Научный руководитель – Бехтерева Елена Сергеевна, доктор физико-математических наук, профессор Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

По итогам обсуждения на общем собрании сотрудников Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» принято следующее заключение:

### • Оценка выполненной соискателем работы.

Диссертация А.Г. Зятьковой является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на актуальную тему и содержащую новые результаты,

опубликованные в научной печати. Положения, выносимые на защиту, не вызывают возражений, имеют научную новизну и теоретически обоснованы в тексте диссертации.

#### **Актуальность темы исследования.**

Значимую роль в определении фундаментальных свойств молекул имеет исследование колебательно-вращательных спектров изотопически замещенных молекул. Как показывает анализ, исследование спектров только «материнской» молекулы, к примеру этилена или метана, не является достаточным для полного определения всех параметров силового поля молекулы, поскольку зачастую в силу более высокой симметрии нет возможности получить информацию о ряде состояний (и, как следствие, о ряде параметров) в силу того, что переходы на них в поглощении запрещены по симметрии и единственным способом получения недостающей информации является исследование спектров различных изотопических производных более низкой симметрии. Таким образом, исследования спектров изотопологов молекул является комплементарными при определении внутренней динамики молекул. Следуя этим рассуждениям, в диссертации сделан акцент на исследовании колебательно-вращательных спектров изотопологов молекул этилена и диоксида серы.

Исследование характеристик поглощения молекул является еще одним важным моментом анализа колебательно-вращательных спектров, поскольку находит применение в прикладных задачах, связанных с определением количества вещества в среде и ее макро-параметров. Развитые в колебательно-вращательной спектроскопии модели эффективных операторов (модель эффективного гамильтониана и модель эффективного оператора дипольного момента) позволяют описывать положения линий и интенсивности с точностями, сравнимыми с экспериментальной погрешностью в определении соответствующих величин. Как правило, при определении интенсивностей в рамках модели эффективного оператора дипольного момента среднее отклонение расчета от эксперимента составляет 3%. Однако, не всегда точность воспроизведения экспериментальных данных является показателем корректного определения набора параметров эффективного дипольного момента. Возникают случаи, когда в процессе решения обратной задачи параметры начинают сильно коррелировать друг с другом, при этом вероятность получения набора физически необоснованных параметров возрастает. Чтобы избежать подобного рода ситуаций необходимо каким-либо образом определить значения данных параметров и использовать рассчитанные значения в качестве первого приближения. Для контроля и устойчивости обратной спектроскопической задачи в диссертационной работе на основе использования операторной теории возмущений и следствий теории симметрии получен ряд формул, определяющих параметры разложения эффективного дипольного момента для замещения  $XYZ \leftarrow XY_2$  как функций фундаментальных параметров.

Кроме всего прочего, в диссертации обсуждается проблема определения компонентного состава изотопологов в газовой смеси. Необходимо заметить, что знание правильного процентного соотношения молекул в газовой смеси позволит избежать ошибки при определении экспериментальных значений интенсивностей

спектральных линий. Для решения этой проблемы в диссертации предложен спектроскопический метод определения парциального давления, который позволяет с точностью порядка 2% определять концентрацию веществ в газовой смеси.

Предложенные в работе методы и выполненные исследования являются актуальными, поскольку призваны сделать проблему исследования интенсивностей однозначной и корректной. Их появление своевременно в связи с возросшими в последнее время потребностями в высокоточной информации, необходимой для целей астрофизики и газоанализа.

**Личное участие автора в получении результатов, изложенных в диссертации.**

подавляющее большинство результатов, вошедших в диссертацию, получены лично автором, как в индивидуальных, так и в коллективных исследованиях. Вклад автора на разных этапах выражался в участии в постановке решаемых задач, самостоятельной разработке путей и методов их решения, разработке алгоритмов и создании программ расчета на языках FORTRAN, MAPLE и МАТНЕМАТИКА, проведении непосредственных расчетов, обсуждении и интерпретации полученных в ходе выполнения работы результатов.

**Степень достоверности результатов проведенных исследований.**

Достоверность результатов диссертационного исследования обеспечивается строгостью используемых моделей и математических методов, соответствием результатов теоретических исследований экспериментальным данным, как ранее известным в литературе, так и полученным впервые в рамках проводимого исследования, а также согласованностью полученных результатов с известными в литературе результатами численных расчетов там, где это возможно.

**Научная новизна результатов, изложенных в диссертации.**

Новизна результатов проведенных исследований обусловлена тем, что в диссертационной работе:

- Впервые исследована система пяти сильно взаимодействующих состояний молекулы транс- $C_2H_2D_2$  в спектральном диапазоне  $1350-1950\text{ см}^{-1}$ .
- Впервые для полосы  $\nu_7+\nu_8$  были определены переходы  $b$ -типа, а для полос  $\nu_8+\nu_{10}$  и  $\nu_6+\nu_7$  найдены запрещенные по симметрии переходы  $d$ -типа.
- Впервые в аналитической форме получены параметры в разложении эффективного дипольного момента молекул типа-XYZ ( $C_s$  симметрии).
- Проведен численный анализ параметров эффективного дипольного момента ранее экспериментально неисследованных фундаментальных колебательных состояний молекулы  $^{32}S^{16}O^{18}O$ .
- Предложен новый метод оценки парциального давления (концентрации) молекул, содержащихся в экспериментальном образце с высокой точностью (на уровне 1-2%).
- Впервые получены параметры эффективного дипольного момента колебательного состояния (010) молекулы  $^{34}SO_2$ .
- Впервые для молекулы  $^{32}S^{16}O^{18}O$  зарегистрированы и исследованы слабые колебательно-вращательные переходы в «горячих» полосах  $\nu_1+\nu_2+\nu_3-\nu_2$  и

$2\nu_2 + \nu_3 - \nu_2$ . Определены параметры эффективного гамильтониана для состояний (021) и (111).

#### **Теоретическая и практическая значимость диссертации.**

- Получена зависимость параметров первого и второго порядков в разложении эффективного дипольного момента для изотопозамещения  $XYZ \leftarrow X_2Y$  от фундаментальных параметров «материнской» молекулы.
- Разработан и реализован метод оценки парциального давления изотопологов в газовой смеси для молекул типа- $XY_2$  ( $C_{2v}$  симметрии).
- Получена информация о спектроскопических параметрах молекул транс- $C_2H_2D_2$ ,  $^{34}SO_2$  и  $^{32}S^{16}O^{18}O$  на основе анализа колебательно-вращательных спектров, которая позволяет предсказывать положения линий в ранее не исследованных спектральных диапазонах этих молекул.
- Получена высокоточная информация об интенсивностях переходов, принадлежащих полосе  $\nu_2$  молекулы  $^{34}SO_2$ , что является существенным дополнением к банкам спектроскопической информации HITRAN и GEISA.
- Определены аналитические выражения для параметров эффективного дипольного момента молекул типа- $XYZ$ , позволяющие предсказывать значения интенсивностей фундаментальных колебательно-вращательных полос молекул типа- $XYZ$  ( $C_s$  симметрии).
- Разработана программа на языке аналитического программирования MAPLE применительно к молекулам  $^{32}S^{16}O_2$ ,  $^{34}S^{16}O_2$ ,  $^{32}S^{18}O_2$  и  $^{32}S^{16}O^{18}O$ , которая позволяет оценивать значения параметров эффективного дипольного момента. Программа может применяться для любых молекул типа  $XY_2(C_{2v})$  и  $XYZ(C_s)$  и может быть модифицирована для молекул, содержащих более четырех атомов. Фундаментальные параметры «материнской» молекулы (гармонические частоты, вращательные параметры, трансформационные коэффициенты и параметры дипольного момента) используются в качестве входных данных.
- Развита методика определения процентного содержания различных изотопологов в смеси. Данный подход имеет отдельную ценность и значимость, поскольку является основой для проведения практических оценок концентраций. Может быть отнесен к высокоточным методам колебательно-вращательной спектроскопии. В работе метод используется применительно к спектрам молекулы  $^{34}SO_2$ . Точность метода составила 2,2%.

Материалы диссертации могут быть использованы в организациях, занимающихся исследованиями в области молекулярной спектроскопии, атмосферной оптики, физики газовых сред и других, в частности в Институте оптики атмосферы им. В. Е. Зуева СО РАН (г. Томск), Институте прикладной физики РАН (г. Нижний Новгород), Институте спектроскопии РАН (г. Троицк Московской обл.).

#### **Апробация результатов диссертации.**

Материалы, вошедшие в диссертацию, докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях: 24-й Международной конференции по

молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Болонья, Италия, 2014), 3-й Международной школе-конференции по оптоэлектронике, фотонике, технике и наноструктурам (Санкт-Петербург, Россия, 2016), 18-м Международном симпозиум-школе молодых учёных по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Томск, Россия, 2015), 24-м Международном коллоквиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Дижон, Франция, 2015), 24-й Международной конференции по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Прага, Чехия, 2016), 25-м Международном коллоквиуме по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Хельсинки, Финляндия, 2017), 14-й Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук» (Томск, Россия, 2017), 25-й Международной конференции по молекулярной спектроскопии высокого разрешения (Бильбао, Испания, 2018), 15-й Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук» (Томск, Россия, 2018).

#### **Ценность научных работ соискателя, полнота изложения материалов диссертации в опубликованных работах**

По материалам диссертации А.Г. Зяtkовой опубликовано 20 работ, в том числе 9 статей в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук (из них 3 статьи в зарубежных научных журналах, индексируемых *Web of Science* и *Scopus*, и 6 статей в российских научных журналах, переводные версии которых индексируются *Web of Science* и *Scopus*), 11 публикаций в сборниках материалов международных и российских научных конференций. Общий объём публикаций – 6,86 а.л., авторский вклад – 4,96 а.л. В опубликованных работах достаточно полно изложены материалы диссертации.

*Статьи в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук:*

1. **Зяtkова А. Г.** Исследование спектра высокого разрешения молекулы транс- $C_2H_2D_2$  в спектральном диапазоне 1900-2000  $cm^{-1}$  / А. Г. Зяtkова, С. И. Кузнецов // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60, № 7. – С. 107–112. – 0,37/0,36 а.л.

*в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science и Scopus:*

**Ziatkova A. G.** Study of the high resolution spectrum of the trans- $C_2H_2D_2$  molecule in the spectral region of 1900-2000  $cm^{-1}$  / A. G. Ziatkova, S. I. Kuznetsov // Russian Physics Journal. – 2017. – Vol. 60, № 7. – P. 1206–1211. – DOI: 10.1007/s11182-017-1196-2.

2. **Зяtkова А. Г.** Инфракрасный спектр высокого разрешения молекулы транс- $C_2H_2D_2$  полосы  $\nu_7 + \nu_8$  / А. Г. Зяtkова, Ю. С. Аслаповская, О. В. Громова, Е. С. Бехтерева, А. Л. Фомченко // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2016. – Т. 59, № 10. – С. 77–81. – 0.75 / 0.57 а.л.

*в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science и Scopus:*

**Ziatkova A. G.** High resolution infrared spectrum of the  $\nu_7+\nu_8$  band of the trans- $C_2H_2D_2$  molecule / A. G. Ziatkova, Yu. S. Aslapovskaya, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, A. L. Fomchenko // Russian Physics Journal. – 2017. – Vol. 59, № 10. – P. 1604–1609. – DOI: 10.1007/s11182-017-0951-8.

3. Ulenikov O. N. First high resolution study of the interacting  $\nu_8+\nu_{10}$ ,  $\nu_6+\nu_{10}$ ,  $\nu_6+\nu_7$  bands and re-analysis of the  $\nu_7+\nu_8$  band of trans- $D_2$ -ethylene / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, Yu. S. Aslapovskaya, **A. G. Ziatkova**, C. Sydow, C. Maul, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2016. – Vol. 184. – P. 76–88. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.06.040. – 1.44 / 0.7 а.л. (*Web of Science* и *Scopus*).

4. Фомченко А. Л. Определение констант форм колебаний молекулы  $C_2H_4$  / А. Л. Фомченко, А. С. Белова, К. Б. Берёзкин, **А. Г. Зяткова** // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2016. – Т. 59, № 7. – С. 130–136. – 0,48 / 0,05 а.л.

*в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science и Scopus:*

Fomchenko A. L. Determination of transformation coefficients of the  $C_2H_4$  molecule / A. L. Fomchenko, A. S. Belova, K. B. Berezkin, **A. G. Ziatkova** // Russian Physics Journal. – 2016. – Vol. 59, is. 7. – P. 1062–1070. – DOI:10.1007/s11182-016-0872-y.

5. Ulenikov O.N. First rotational analysis of the (111) and (021) vibrational state of  $S^{16}O^{18}O$  from the “hot”  $\nu_1+\nu_2+\nu_3-\nu_2$  and  $2\nu_2+\nu_3-\nu_2$  bands / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **A. G. Ziatkova**, E. A. Sklyarova, S. I. Kuznetsov, C. Sydow, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2017. – Vol. 202. – P. 98–103. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.06.040. – 0.35 / 0.3 а.л. (*Web of Science* и *Scopus*).

6. **Зяткова А. Г.** Исследование спектра высокого разрешения молекулы  $S^{18}O^{16}O$  «горячей полосы»  $2\nu_2+\nu_3-\nu_2$  / А. Г. Зяткова, О. В. Громова, О. Н. Улеников // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2018. – Т. 61, №. 1. – С. 35-39 – 0,4 / 0,35 а.л.

*в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science и Scopus:*

**Ziatkova A. G.** Study of the High resolution spectrum of the  $S^{18}O^{16}O$  molecule in the hot  $2\nu_2+\nu_3-\nu_2$  band / A. G. Ziatkova, O. V. Gromova, O. N. Ulenikov // Russian Physics Journal. – 2017 – Vol. 61, №. 1. – P. 36-40. – DOI: 10.1007/s11182-018-1363-0.

7. **Зяткова А. Г.** Исследование количественных характеристик поглощения в полосе  $\nu_2$  молекулы  $^{34}SO_2$  / А. Г. Зяткова, Ю. Б. Моржикова // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2018 – Т. 61, №. 4. – С. 172-176. – 0,4 / 0,38.

*в переводной версии журнала, индексируемой Web of Science и Scopus:*

**Ziatkova A. G.** Study of the quantitative absorption characteristics in the  $\nu_2$  band of the  $^{34}SO_2$  molecule / A. G. Ziatkova, Y. B. Morzhikov // Russian Physics Journal. – 2018. – Vol. 61, №. 4. – P. 796-800. – DOI: 10.1007/s11182-018-1461-z.

8. **Зяткова А. Г.** Исследование спектра высокого разрешения полосы  $\nu_2$  диоксида серы / А. Г. Зяткова, В. А. Замотаева, И. А. Конов // Оптика атмосферы и океанов. – 2018. – Т. 31, № 4. – С. 263–267. – 0,4 / 0,2.

9. Ulenikov O. N., First line strengths analysis of  $^{34}SO_2$  in the  $\nu_2$  region: Isotopic relations for the dipole moment parameters / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V.

Gromova, A. G. Ziatkova, C. Sydow, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2018. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2018.11.031. – 1.1 / 1.0 а.л. (*Web of Science* и *Scopus*).

*Публикации в сборниках материалов конференций:*

10. **Ziatkova A. G.** Sulfur dioxide application of operator perturbation and isotopic substitution theories to the dipole moment analysis / A. G. Ziatkova, N. V. Kashirina, Yu. S. Aslapovskaya, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, O. N. Ulenikov, S. Bauerecker // 24th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. Prague, Czech Republic, August 30 – September 03, 2016. – Prague, 2016. – P. 172. – 0.02 / 0.006 а.л.

11. Ulenikov O. N. High resolution Fourier transform spectrum of trans-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>D<sub>2</sub> in the region of 1200–2000 cm<sup>-1</sup> / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, Yu. S. Aslapovskaya, **A. G. Litvinovskaya (Ziatkova)**, S. Bauerecker // The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. Bologna, Italy, September 02–06, 2014. – Bologna, 2014. – P. 242. – 0.07 / 0.05 а.л.

12. Ulenikov O. N. High resolution analysis of the C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>D<sub>2</sub>-trans molecule in the region of 1400–2000 cm<sup>-1</sup> / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **A. G. Litvinovskaya (Ziatkova)**, Yu. S. Aslapovskaya, S. Bauerecker, C. Sydow // The 24th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. Dijon, France, August 24–28, 2015. – Dijon, 2015. – P. 301. – 0.05 / 0.03 а.л.

13. Zyatkova A. G. The high-resolution infrared spectrum of the set of weak bands of trans-D<sub>2</sub>-ethylene in the region 1450–1750 cm<sup>-1</sup> / **A. G. Zyatkova**, Yu. S. Aslapovskaya // Saint Petersburg OPEN 2016: Book of Abstracts of the 3rd International School and Conference Optoelectronics, Photonics, Engineering and Nanostructures. Saint Petersburg, Russia, March 28–30, 2016. – Saint Petersburg, 2016. – P. 599–600. – 0.09 / 0.07 а.л.

14. **Litvinovskaya (Ziatkova) A. G.** A high resolution analysis of weak absorption band of C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>D<sub>2</sub>-trans: The ν<sub>8</sub>+ν<sub>10</sub> (A<sub>u</sub>) band / A. G. Litvinovskaya (Ziatkova), N. I. Raspopova, F. Zhang // The XVIIIth Symposium and School on High Resolution Molecular Spectroscopy (HighRus-2015): Abstracts of Reports. Tomsk, Russia, June 30 – July 04, 2015. – Tomsk, 2015. – P. 65. – 0.1 / 0.07 а.л.

15. **Зяцькова А. Г.**, Исследование колебательно-вращательного спектра молекулы транс-C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>D<sub>2</sub> в диапазоне 1450–1650 см<sup>-1</sup> / А. Г. Зяцькова // XIV Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук»: Сборник научных трудов. Томск, Россия, Апрель 25 – 28, 2017. – Томск, 2017. – С. 132–134. – 0,2 / 0,2 а.л.

16. **Ziatkova A. G.** Application of the operator perturbation and isotopic substitution theories to the sulfur dioxide dipole moment analysis / A. G. Ziatkova, X. Chang, E. A. Sklyarova, O. N. Ulenikov, S. Bauerecker // The 25th Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. Helsinki, Finland, August 20–25, 2017. – Helsinki, 2017. – P. 267. – 0.02 / 0.01 а.л.

17. **Ziatkova A. G.**, Fourier transform spectrum of <sup>34</sup>SO<sub>2</sub> in the region of the ν<sub>2</sub> bending fundamental band / A. G. Ziatkova, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, S.

Bauerecker, C. Sydow, G. Mellau, M. Quack, O. N. Ulenikov // 25th International Conference of High Resolution Molecular Spectroscopy: Book of Abstracts. Bilbao, Spain, September 03-07, 2018. – Bilbao, 2018. – P. 259. – 0.02 / 0.01 а.л.

18. **Зятькова А. Г.**, Разработка алгоритма и исследование интенсивностей в полосе  $\nu_2$  молекулы  $^{34}\text{SO}_2$  / А. Г. Зятькова // XV Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук»: Сборник научных трудов. Томск, Россия, Апрель 24 – 27, 2018. – Томск, 2018. – С. 138–140. – 0,2 / 0,2 а.л.

19. Инь И. Исследование колебательно-вращательного спектра молекулы  $^{34}\text{SO}_2$  в диапазоне 440-620  $\text{cm}^{-1}$  / И. Инь, **А. Г. Зятькова** // XV Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук»: Сборник научных трудов. Томск, Россия, Апрель 24 – 27, 2018. – Томск, 2018. – С. 147–149. – 0,2 / 0,2 а.л.

20. Л. Цзинь линь Получение параметров эффективного дипольного момента в аналитическом виде для молекулы  $\text{SO}_2$  / Л. Цзинь линь, **А. Г. Зятькова** // XV Международная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук»: Сборник научных трудов. Томск, Россия, Апрель 24 – 27, 2018. – Томск, 2018. – С. 192–194. – 0,2 / 0,2 а.л.


#### **Соответствие содержания диссертации избранной специальности**

Содержание диссертации соответствует специальности 01.04.05 – Оптика (физико-математические науки).

Представленная работа полностью соответствует требованиям Порядка присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете.

Диссертация «**Исследование количественных характеристик поглощения изотопологов диоксида серы и этилена**» Зятьковой Анастасии Георгиевны рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

Заключение принято на общем собрании сотрудников Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет». Присутствовало на заседании – 20 чел. Результаты голосования: «за» – 20 чел., «против» – нет, «воздержалось» – нет, протокол № 07/19 от «29» апреля 2019 г.

Председатель общего собрания сотрудников ИШФВП,  Л.Г. Сухих д.ф.-м.н., директор ИШФВП ТПУ

Секретарь общего собрания сотрудников, к.т.н., начальник ОО ИШФВП ТПУ

 И.А. Лариошина



## ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

доктора физико-математических наук, профессора Бехтеревой Елены Сергеевны  
о диссертационной работе Зяцьковой Анастасии Георгиевны по теме  
«Исследование количественных характеристик поглощения изотопологов диоксида серы и  
этилена», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-  
математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика

Зяцькова Анастасия Георгиевна в 2013 году поступила на физический факультет Томского государственного университета, который с отличием окончила в 2015 году по направлению подготовки «Физика», квалификация «Магистр». В 2015 году она поступила в аспирантуру Томского политехнического университета на очное отделение по специальности 01.04.05 – Оптика.

В процессе обучения в магистратуре и аспирантуре Зяцькова А.Г. проявила такие важные качества исследователя, как трудолюбие, энтузиазм, терпение и настойчивость в освоении сложных методов теоретической физики и применение их для исследования внутренней динамики многоатомных молекул на основе высокоточной информации о спектрах высокого разрешения этих молекул. В дополнение ко всему, Зяцькова А.Г. ведет активную педагогическую деятельность. В прошлом году она руководила научной работой двух студентов четвертого курса Отделения экспериментальной физики, Инженерной школы ядерных технологий, ТПУ. На настоящий момент является ассистентом в Отделении естественных наук, Школы базовой инженерной подготовки, ТПУ. Настойчивость и нацеленность на получение результата помогают ей с успехом справляться с разнообразными непростыми задачами.

В дополнение к этому, Зяцькова А.Г. проявила себя как талантливый молодой исследователь, идейный и способный к самостоятельной научной работе. В частности, к настоящему времени, Зяцькова А.Г., будучи аспиранткой 4 года является автором 20 публикаций, в том числе 9 статей, из них 3 в международном реферируемом журнале «Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer» и 5 в журналах, рекомендованных ВАК «Известия высших учебных заведений. Физика» и «Оптика атмосферы и океанов», а также 11 публикаций в сборниках трудов международных и российских конференций, а именно, Прага (Чешская Республика, 2012 г., 2016 г.), Будапешт (Венгрия, 2013 г.), Болонья (Италия, 2014 г.), Санкт-Петербург (Россия, 2015 г., 2016 г.), Дижон (Франция, 2015 г.), Новосибирск (Россия, 2015 г.) и Томск (Россия, 2015 г., 2017 г., 2018 г.), Бильбао (Испания, 2018 г.). Показателем ее успешной научной деятельности является, в частности, тот факт, что на данный момент Зяцькова А.Г. является победителем конкурса о назначении Стипендии Правительства РФ (2017-2018 уч. год.), соисполнителем по научным грантам (№ 18-12-00058, 18-32-00116 и 16-32-00306), грантополучателем Благотворительного Фонда культурных инициатив (Фонда Михаила Прохорова) (2014 год.). В 2015 году Зяцькова А.Г. получила индивидуальный грант Университета Бургундии (г. Дижон, Франция) на обучения по программе Master II. В результате успешной сдачи сессии получила диплом Магистра Университета Бургундии по специальности «Физика, Лазеры и Материалы».

Диссертация Зяцьковой А.Г. посвящена решению проблем современной молекулярной спектроскопии, возникающих при исследовании колебательно-вращательных спектров высокого разрешения молекул асимметричного волчка.

В контексте существующей проблемы определения внутримолекулярной потенциальной функции этилена, рассматривается спектр ранее неисследованного диапазона  $1350-1950\text{ см}^{-1}$ , дважды дейтерированных изотопологов этилена, а именно, молекулы транс- $\text{C}_2\text{H}_2\text{D}_2$ . Успешно проведен анализ спектра, решена обратная спектроскопическая задача и получен набор спектроскопических параметров, с учетом резонансных взаимодействий между колебательными состояниями. Корректность

полученных результатов подтверждается высокой предсказательной способностью набора спектроскопических параметров.

Большое внимание в диссертации Зятьковой А.Г. уделяется проблеме определения интенсивностей колебательно-вращательных линий и параметров эффективного дипольного момента. Особенно стоит отметить, развитый в диссертации, метод определения параметров эффективного дипольного момента молекул типа-XYZ ( $C_s$  симметрии), который основан на формализме операторной теории возмущений и теории групп. Представленный в диссертации подход позволяет предсказывать параметры эффективного дипольного момента молекул типа-XYZ как простые функции хорошо изученных параметров материнской молекулы.

Для получения объективных данных об интенсивностях колебательно-вращательных переходов необходимо правильно учитывать значения макро параметров, таких, как температура, давление, концентрации компонентов. В особенности эта проблема имеет место при исследовании молекулярных газовых смесей, содержащих различные изотопные модификации. Для решения проблемы определения концентрации компонентов в диссертационной работе развит метод оценки парциального давления молекул в экспериментальном образце. В дополнение к этому, в диссертационной работе Зятьковой А.Г. впервые выполнен анализ интенсивностей и получен набор параметров эффективного дипольного момента для фундаментальной полосы  $\nu_2$  молекулы  $^{34}\text{SO}_2$ .

Предложенные в работе методы являются практически необходимыми при исследовании количественных характеристик колебательно-вращательных спектров, представляющих интерес для различных областей физики, химии, атмосферной оптики, астрофизики. Новая информация, полученная в работе для молекул диоксида серы и этилена, используется для пополнения международных спектроскопических баз данных.

В процессе работы над диссертацией А. Г. Зятькова проявила себя как целеустремленный исследователь с незаурядным трудолюбием и эрудированностью, которые помогают ей эффективно решать разнообразные и непростые научные задач.

Считаю, что диссертация А. Г. Зятьковой является законченным научным исследованием и полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук согласно Порядку присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете. А. Г. Зятькова заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

Научный руководитель, д.ф.-м.н.,  
профессор исследовательской школы  
физики высокоэнергетических процессов  
федерального государственного автономного  
образовательного учреждения высшего образования  
«Национальный исследовательский  
Томский политехнический университет»,  
доктор физико-математических наук,

  
Бехтерева Елена Сергеевна

Раб. Адрес: 634050, г. Томск, проспект Ленина, 30, ТПУ  
e-mail: bektereva@tpu.ru; тел.: 8 (913) 886-50-74

Подпись Е. С. Бехтеревой удостоверяю  
Ученый секретарь Ученого совета НИ ТПУ



  
О. А. Ананьева

25.04.1977.