**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

экспертной комиссии диссертационного совета ДС.ТПУ.02 на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национального исследовательского Томского политехнического университета» по предварительному рассмотрению диссертации Зятьковой Анастасии Георгиевны на тему «Исследование количественных характеристик поглощения изотопологов диоксида серы и этилена», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика

«21» 05 2019 г.

**Комиссия диссертационного совета ДС.ТПУ.02 в составе:**

Председатель: Уленеков Олег Николаевич – д.ф.-м.н., профессор Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов Национального исследовательского Томского политехнического университета;

Члены комиссии:

Бехтерева Елена Сергеевна – д.ф.-м.н., профессор Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов Национального исследовательского Томского политехнического университета;

Фомченко Анна Леонидовна – секретарь диссертационного совета ДС.ТПУ.02, к.ф.-м.н., Ph.D, доцент Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов Национального исследовательского Томского политехнического университета;

Громова Ольга Васильевна – к.ф.-м.н., Ph.D, профессор Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов Национального исследовательского Томского политехнического университета,

рассмотрели диссертационную работу Зятьковой Анастасии Георгиевны на тему «Исследование количественных характеристик поглощения изотопологов диоксида серы и этилена», выполненную в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальном исследовательском Томском политехническом университете» (ИШФВП ТПУ).

Диссертационная работа изложена на 149 страницах и состоит из введения, четырех глав, заключения, списка используемой при написании диссертации литературы из 117 наименований и одного приложения. Диссертация содержит 19 рисунков и 29 таблиц.

Комиссия провела проверку и установила идентичность текста диссертации, представленной в диссертационный совет на бумажном носителе, тексту диссертации в электронном варианте в формате *.pdf. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты.

Комиссия, предварительно рассмотрев диссертацию Зятьковой Анастасии Георгиевны на тему «Исследование количественных характеристик поглощения изотопологов диоксида серы и этилена», пришла к выводу о соответствии указанной диссертации требованиям п.п. 8-12 «Порядок присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете», утвержденного приказом ФГАОУ ВО НИ ТПУ от 6 декабря 2018 г. №93/од.

Тематика диссертации посвящена исследованию количественных характеристик поглощения молекул этилена, диоксида серы и их изотопологов.

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

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

Для достижения поставленной цели в диссертационной работе были решены следующие задачи:

1. Проведен анализ тонкой структуры спектров высокого разрешения молекулы транс-$C_2H_2D_2$, зарегистрированных с характеристиками существенно лучшими, чем ранее, в диапазоне 1350-1950 $см^{-1}$ с целью получения новой информации о возбужденных состояниях этой молекулы;
2. Выполнена теоретическая оценка параметров в разложении эффективного дипольного момента с использованием методов операторной теории возмущений и теории изотопозамещения для молекул типа-$XY_2(C_{2v})$ и $XYZ(C_s)$. На этой основе, разработан алгоритм и создана программа на аналитическом языке программирования MAPLE. Проверена корректность разработанных программных средств для изотопологов диоксида серы: $^{32}S^{16}O_2$, $^{34}S^{16}O_2$, $^{32}S^{18}O_2$ и $^{32}S^{16}O^{18}O$;
3. Разработан метод оценки парциального давления изотопологов $SO_2$, входящих в экспериментальный образец с использованием основных принципов теории изотопозамещения и Фурье-спектроскопии;
4. Определены параметры в разложении эффективного дипольного момента полосы $\nu_2$ молекулы $^{34}SO_2$, используя в качестве исходных данных экспериментальную информацию об интенсивностях спектральных линий и предложенный метод оценки процентного содержания изотопологов в экспериментальном образце;
5. Исследованы слабые «горячие» полосы $2\nu_2+\nu_3-\nu_2$ и $\nu_1+\nu_2+\nu_3-\nu_2$ молекулы $^{32}S^{16}O^{18}O$ с целью получения новой информации о колебательно-вращательных состояниях (021) и (111).

В диссертации информация представлена логично и структурировано, обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты в области колебательно-вращательной спектроскопии. Работа имеет фундаментальный характер и содержит сведения о возможных путях использования полученных научных результатов. Текст диссертации оригинален и полностью написан автором. В материалах диссертации и автореферате не содержится сведений ограниченного распространения, работа может быть опубликована в открытой печати.

В результате проведенных исследований в диссертации: предложен новый метод оценки парциального давления изотопологов $SO_2$; впервые получены аналитические выражения для параметров эффективного дипольного момента фундаментальных полос молекул типа XYZ ($C_s$ симметрии); впервые исследована вращательная структура колебательных состояний (021) и (111) молекулы $^{32}S^{16}O^{18}O$, впервые получен набор спектроскопических параметров, описывающих систему сильно взаимодействующих состояний ($v_8=v_{10}=1$), ($v_7=v_8=1$), ($v_6=v_{10}=1$) и ($v_6=v_7=1$) в спектре молекулы транс-$C_2H_2D_2$; впервые определены интенсивности отдельных линий полосы $\nu_2$ молекулы $^{34}SO_2$. Название диссертации, ее цель и задачи содержат ключевые понятия и слова из паспорта заявленной научной специальности.

По тематике, объектам и области исследования, разработанным автором новым научным положениям, научной и практической значимости представленная диссертация соответствует специальности 01.04.05 – Оптика согласно следующим пунктам паспорта:

1. Молекулярная оптика. Дисперсия, поглощение, рассеяние света. Оптическая активность сред и структур. Оптика сред при внешних воздействиях. Оптические исследования фундаментальных свойств материи.
2. Квантовая природа света. Спонтанные и вынужденные процессы. Статистика фотонов. Оптические методы передачи и обработки информации, физические основы квантовых вычислений.
3. Люминесценция. Излучение и поглощение света изолированными и взаимодействующими атомами и молекулами. Источники света. Физические основы методов и техники спектроскопии. Лазерная спектроскопия, оптические прецизионные измерения и стандарты, спектроскопия одиночных атомов.

Основные результаты диссертации опубликованы в 20 печатных работах: 6 статей в изданиях, рекомендованных ВАК; 3 статьи в международных журналах, индексируемых в *Web of Science* и *Scopus*; 11 публикаций в материалах всероссийских и международных конференций.

По представленному библиографическому списку и перечню собственных публикаций автора можно сделать заключение о том, что основные положения диссертации достаточно полно изложены в опубликованных соискателем работах и апробированы на научных конференциях. Требования к публикации основных научных результатов диссертации выполнены полностью.

Анализ текстов диссертации, публикаций соискателя и списка использованных источников позволяет сделать вывод, что в диссертации заимствованные материалы и отдельные результаты приводятся со ссылками на источники заимствования или их автора.

Ссылки на библиографические источники, включая собственные публикации автора, оформлены в соответствии с требованиями стандарта, а библиографический список характеризует серьезную глубину изучения автором рассматриваемого в работе научного направления.

**Заключение.**

Тема и содержания диссертационной работы Зятьковой Анастасии Георгиевны «Исследование количественных характеристик поглощения изотопологов диоксида серы и этилена» соответствует научной специальности 01.04.05 – Оптика.

Материалы диссертации в полной мере изложены в работах, опубликованных соискателем ученой степени. Выполнены требования к публикациям основных научных результатов диссертационной работы, предусмотренные пунктами 10 и 11 Порядка присуждения ученых степеней, утвержденного приказом Национального исследовательского Томского политехнического университета от 6 декабря 2018 г. № 93/од.

В диссертации отсутствуют материалы, заимствованные без ссылки на авторов и источники заимствования, результаты научных работ, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, без ссылок на соавторов. Автореферат отражает содержание диссертационной работы.

На основании вышеизложенного комиссия считает возможным принять диссертацию Зятьковой Анастасии Георгиевны «Исследование количественных характеристик поглощения изотопологов диоксида серы и этилена» к защите в совете ДС.ТПУ.02 на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

**Председатель комиссии:**
д.ф.-м.н., профессор _____О.Н. Уленеков

**Члены комиссии:**

д.ф.-м.н., профессор _____Е.С. Бехтерева

к.ф.-м.н., Ph.D, доцент _____А.Л. Фомченко

к.ф.-м.н., Ph.D, профессор _____О.В. Громова