

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

«14» 10 2019 г.

Комиссия диссертационного совета ДС.ТПУ.02 в составе:

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

Члены комиссии:

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

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

Коротченко Константин Борисович – д.ф.-м.н., доцент, профессор Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов Национального исследовательского Томского политехнического университета;

Петрова Татьяна Михайловна – д.ф.-м.н., доцент, ведущий научный сотрудник лаборатории молекулярной спектроскопии Института оптики атмосферы им. В. Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук,

рассмотрели диссертационную работу Замотаевой Валерии Александровны на тему «Исследование колебательно-вращательных спектров изотопологов диоксида серы», выполненную в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальном исследовательском Томском политехническом университете» (ИШФВП ТПУ), а также в Междисциплинарной исследовательской лаборатории Карно-Бургундия Национального центра научных исследований в составе Докторской школы Карно-Пастер Университета Бургундии – Франш-Конте (Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne UMR 6303 CNRS UBFC).

Диссертационная работа изложена на 183 страницах и состоит из введения, четырех глав, заключения, списка используемой при написании диссертации литературы из 104 наименований. Диссертация содержит 31 рисунок и 47 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 Замотаевой Валерии Александровны на тему «Исследование колебательно-вращательных спектров изотопологов диоксида серы», 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 в редакции приказа от 28 августа 2019 г. № 66.

Тематика диссертации посвящена исследованию колебательно-вращательных спектров изотопологов диоксида серы.

Целью работы является исследование спектров высокого разрешения молекулы диоксида серы и ее изотопологов и на этой основе определение фундаментальных характеристик молекулы SO_2 .

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

1. Проведено исследование тонкой структуры колебательно-вращательных полос молекул, $^{M}_{\text{S}}\text{N}^{\text{K}}\text{O}^{\text{K}}\text{O}$ ($M=32, 34$, $N/K=16, 18$) типа асимметричного волчка, зарегистрированных с высоким разрешением в широком диапазоне;
2. Определены энергетические структуры возбужденных колебательно-вращательных состояний с точностями не хуже экспериментальных погрешностей в определении положений колебательно-вращательных линий;
3. Из решения обратных спектроскопических задач в рамках эффективных операторов определены параметры модели, отвечающие требованиям физической корректности для исследуемых систем взаимодействующих колебательно-вращательных состояний;
4. На основе доступной на данный момент информации о колебательных центрах, а также колебательно-вращательных энергиях возбужденных состояний для всех изотопологов диоксида серы, произвести уточнение параметров функции потенциальной энергии.

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: впервые с высоким разрешением зарегистрированы инфракрасные Фурье-спектры изотопологов диоксида серы, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ и $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$, в диапазоне комбинационных и обертоновых полос; впервые выполнен анализ тонкой структуры ряда колебательно-вращательных полос поглощения молекулы диоксида серы и её различных изотопических модификаций; впервые получены параметры эффективных гамильтонианов полиад взаимодействующих состояний для молекул $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ и $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$, позволяющие восстановить с экспериментальной точностью колебательно-вращательную структуру исследуемых спектров; выполнен расчёт внутримолекулярной потенциальной функции диоксида серы, учитывающий колебательные центры и колебательно-вращательные уровни основного и возбужденных состояний как симметрично-замещенных модификаций $^{32}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{34}\text{S}^{16}\text{O}_2$, $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$, так и несимметрично-замещенной модификации $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$. 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 материалы исследований, изложенные в диссертации, опубликованы в 15 печатных работах: 3 статьи в изданиях, рекомендованных ВАК; 4 статьи в международных журналах, индексируемых в *Web of Science* и *Scopus*; 8 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 текста 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 Замотаевой Валерии Александровны «Исследование колебательно-вращательных спектров изотопологов диоксида серы» 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 редакции приказа от 28 августа 2019 г. № 66.

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 Замотаевой Валерии Александровны «Исследование колебательно-вращательных спектров изотопологов диоксида серы» к защите в совете ДС.ТПУ.02 на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – Оптика.

Председатель комиссии:

д.ф.-м.н., доцент

 Е.С. Бехтерева

Члены комиссии:

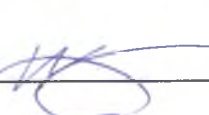
д.ф.-м.н., профессор

 О.Н. Уленев

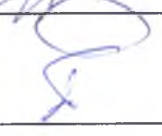
к.ф.-м.н.

 А.Л. Фомченко

д.ф.-м.н., доцент

 К.Б. Коротченко

д.ф.-м.н., доцент

 Т.М. Петрова