# ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА ДС.ТПУ.02, СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

решение диссертационного совета ДС.ТПУ.02 от 18.12.2019 г. № 4

О присуждении Замотаевой Валерии Александровне, гражданке РФ, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Исследование колебательно-вращательных спектров изотопологов диоксида серы»
по специальности 01.04.05 – Оптика
принята к защите 15.10.2019 (протокол заседания № 3) диссертационным советом ДС.ТПУ.02, созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования (ФГАОУ ВО) «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (НИ ТПУ), Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 634050, г. Томск, пр. Ленина 30, приказом по ФГАОУ ВО НИ ТПУ № 15895 от 06.12.2018 года.

Соискатель Замотаева Валерия Александровна, 1992 года рождения.

В 2015 г. соискатель окончила федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет»

по направлению подготовки «Физика» (квалификация «Магистр», диплом с отличием).

Диплом об окончании аспирантуры выдан в 2019 г. федеральным государственным автономным образовательным учреждением высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

Диссертация выполнена в Исследовательской школе физики высокоэнергетических процессов федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 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).

Научные руководители:

Уленеков Олег Николаевич, доктор физико-математических наук, профессор, основное место работы: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Исследовательская школа физики высокоэнергетических процессов, профессор;

Клод Леруа, HDR, Professeur des Universités, основное место работы: Университет Бургундии – Франш-Конте, Междисциплинарная исследовательская лаборатория Карно-Бургундия Национального центра научных исследований (Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne UMR 6303 CNRS UBFC), профессор.

Дополнительно введенные члены диссертационного совета ДС.ТПУ.02:

**Громова Ольга Васильевна,** Ph.D., профессор Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»;

**Пичугин Владимир Фёдорович**, доктор физико-математических наук, профессор, профессор Исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»;

Официальные оппоненты:

**Быков Александр Дмитриевич**, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории молекулярной спектроскопии федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт оптики атмосферы им. В. Е. Зуева» СО РАН, г. Томск;

**Краснощёков Сергей Вадимович**, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории строения и квантовой механики молекул кафедры физической химии федерального государственного бюджетного образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», г. Москва

дали положительные отзывы на диссертацию.

Выбор официальных оппонентов и дополнительно введённых членов диссертационного совета обосновывается их высокой квалификацией в области молекулярной спектроскопии, широкой известностью своими достижениями в области физико-математических наук, наличием публикаций по выполненным исследованиям, близким к теме работы соискателя, опытом научно-исследовательской работы.

Соискатель имеет 22 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации опубликовано 15 работ, из них в рецензируемых изданиях опубликовано 7 работ. Общий объем научных изданий составляет 7,05 печатных листов с долей авторского участия не менее 70%. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах.

Наиболее значимые научные работы:

1. Ulenikov O. N. First high resolution analysis of the $2\nu_1$, $2\nu_3$, and $\nu_1 + \nu_3$ bands of $S^{18}O_2$ / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, **V. A. Zamotaeva,** E. A. Sklyarova, C. Sydow, C. Maul, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. – 2016. –Vol. 185. – P. 12–21. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.08.008. – 1,045 / 0,9 а.л. (*Web of Science* и *Scopus*).
2. Ulenikov O. N. Study of the high resolution spectrum of $^{32}S^{16}O^{18}O$: The $\nu_1$ and $\nu_3$ bands / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, Yu. V. Krivchikova, **V. A. Zamotaeva,** T. Buttersack, C. Sydow, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. – 2016. – Vol. 168. – P. 29–39. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2015.08.010. – 1,18 / 1 а.л. (*Web of Science* и *Scopus*).
3. Ulenikov O. N. First higher resolution analysis of the $\nu_1+\nu_2$ and $\nu_2+\nu_3$ bands of $S^{18}O_2$ / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, **V. A. Zamotaeva,** S. I. Kuznetsov, C. Sydow, C. Maul, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. – 2016. – Vol. 179. – P. 187–197. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.03.038. – 1,19 / 1 а.л. (*Web of Science* и *Scopus*).
4. Ulenikov O. N. High resolution study of the rotational structure of doubly excited vibrational states of $^{32}S^{16}O^{18}O$: The first analysis of the $2\nu_1$, $\nu_1+\nu_3$, and $2\nu_3$ bands / O. N. Ulenikov, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, **V. A. Zamotaeva,** S. I. Kuznetsov, C. Sydow, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. – 2017. – Vol. 189. – P. 344–350. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2016.12.019. – 0,93 / 0,7 а.л. (*Web of Science* и *Scopus*).

5. **Замотаева В. А.** Исследование спектра высокого разрешения полосы $2\nu_3$ молекулы $^{32}S^{18}O_2$ / **В. А. Замотаева,** Ю. С. Аслаповская, К. С. Васильев, Л. Е. Федотов, Е. С. Бехтерева, А. Г. Зятькова // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2017. – Т. 60, №. 1. – С. 3–7. – 0,67 / 0,55 а.л.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Отзыв на автореферат от к.ф.-м.н., Моржиковой Юлии Борисовны, доцента Школы базовой инженерной подготовки Национального исследовательского Томского политехнического университета (с замечаниями);
2. Отзыв на автореферат от д.ф.-м.н., Москаленко Николая Ивановича, профессора кафедры «Энергетическое машиностроение» Казанского государственного энергетического университета (без замечаний);
3. Отзыв на автореферат от д.ф.-м.н., Онопенко Галины Александровны, профессора кафедры прикладной математики Общеобразовательного факультета ФГБОУ ВО ТГАСУ (без замечаний);
4. Отзыв на автореферат от д.ф.-м.н., Черепанова Виктора Николаевича, доцента, заведующего кафедры оптики и спектроскопии Национального исследовательского Томского государственного университета (без замечаний);
5. Отзыв на автореферат от д.ф.-м.н., Фирсова Константина Михайловича, профессора кафедры радиофизики, Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Волгоградский государственный университет» (без замечаний).

Все поступившие отзывы на автореферат положительные, замечание является рекомендательным и касается вопроса оформления автореферата. Замечание не затрагивает существа работы и сделанных в диссертации выводов.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

**получен** ряд соотношений, позволяющих предсказывать спектроскопические Δ- и *H*-параметры симметрично-замещённого изотополога с точностью не хуже 5–10 %;

**доказано**, что предложенный в работе подход, заключающийся в определённом выборе Морзе-подобных координат, позволяет воспроизводить колебательную структуру всех известных на настоящий момент изотопологов диоксида серы с точностью не хуже 0,02 $см^{-1}$;

**получен** набор параметров, дающий возможность описывать колебательно-вращательную структуру первой гексады резонирующих колебательно-вращательных состояний в молекуле $^{32}S^{18}O_2$ со среднеквадратичным отклонением $1{,}74\times10^{-4}$ $см^{-1}$.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что**:

**определены** спектроскопические параметры полиад взаимодействующих состояний в результате учёта многочисленных резонансных взаимодействий при формулировке и построении эффективных гамильтонианов исследуемых молекул;

на основе теории изотопозамещения **получены** соотношения, позволяющие производить оценку спектроскопических параметров изотопических модификаций диоксида серы, таких как $^{32}S^{18}O_2$, $^{32}S^{16}O^{18}O$;

**улучшена** структура основного колебательного состояния для изотополога $^{32}S^{18}O_2$;

**уточнены** равновесные структурные параметры и определена квадратичная часть внутримолекулярной потенциальной функции молекулы диоксида серы, при учёте большого количества изотопологов.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

**получен** большой объём новых высокоточных данных о колебательно-вращательном энергетическом спектре молекул $^{32}S^{16}O_2$, $^{34}S^{16}O_2$, $^{32}S^{18}O_2$,

$^{32}S^{16}O^{18}O$. В общей сложности около 38000 колебательно-вращательных линий были отнесены к 17 полосам поглощения, зарегистрированных впервые с высоким разрешением в инфракрасном диапазоне. Эти новые данные могут быть использованы для решения различных задач, например, для расчетов спектров излучения или рассеяния, вычисления термодинамических функций указанных молекул;

**полученная информация является** существенным дополнением к имеющимся спектроскопическим банкам данных HITRAN и GEISA.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

**согласованность** результатов и выводов с современными представлениями теоретической колебательно - вращательной спектроскопии и с результатами других авторов (в тех случаях, когда это было возможно), а также с результатами соответствующих экспериментальных исследований;

**использованы** современные методики сбора и обработки исходной информации;

**концепция постановки задачи**, а также план работ основывается на многолетнем опыте выполнения подобных исследований, проводимых в группе молекулярной спектроскопии высокого разрешения НИ ТПУ;

**некоторая часть полученных результатов** уточняет ранее известные данные, но не противоречит им.

**Личный вклад соискателя состоит** в непосредственном проведении анализа всех зарегистрированных спектров, рассмотрении свойств симметрии исследуемых молекул, определении типов взаимодействий и идентификации линий в спектрах, решении обратных задач, анализе резонансных взаимодействий и численных расчётов параметров моделей, также автором самостоятельно выдвинуты защищаемые научные положения, сделаны выводы и даны рекомендации по результатам исследования.

Диссертация является законченной научно-квалификационной работой, в которой было получено большое количество новой высокоточной спектроскопической информации о молекуле диоксида серы и трёх её изотопических модификациях, и соответствует п. 8 «Порядка присуждения учёных степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете» (приказ № 93/од от 6 декабря 2018 г.).

На заседании 18 декабря 2019 года диссертационный совет ДС.ТПУ.02 принял решение присудить Замотаевой Валерии Александровне учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет ДС.ТПУ.02 в количестве 7 человек, из них 6 докторов наук и 1 PhD по защищаемой специальности 01.04.05 – Оптика, участвующих в заседании, из 3 человек, входящих в состав совета, и 4 человек дополнительно введённых в состав совета, проголосовали: за «7» , против «нет», недействительных бюллетеней «нет».

Заместитель председателя
диссертационного совета
ДС.ТПУ.02 Бехтерева Елена Сергеевна

Учёный секретарь
диссертационного совета
ДС.ТПУ.02 Фомченко Анна Леонидовна

18 декабря 2019 г.