



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук» (ИПФ РАН)

по диссертации Балашова Александра Андреевича «Высокоточные измерения формы линий монооксида углерода: спектральные проявления неидеальности газов» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности: 1.3.4. Радиофизика.

Работа выполнена в Отделе микроволновой спектроскопии (отд. 380) Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук».

Научный руководитель – Третьяков Михаил Юрьевич, заведующий отделом микроволновой спектроскопии ИПФ РАН, доктор физико-математических наук.

В 2019 г. соискатель ученой степени окончил магистратуру в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования "Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского" по направлению подготовки 03.04.03. Радиофизика.

В период с 01.09.2019 по 31.08.2023 обучался в аспирантуре Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук».

Свидетельство об окончании аспирантуры № 105200 00000006 от 10 июля 2023 года.

В период подготовки диссертации соискатель Балашов Александр Андреевич работал младшим научным сотрудником в отделе микроволновой спектроскопии (отд. 380) Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук».

Личное участие аспиранта в получении результатов, изложенных в диссертации

Все выносимые на защиту результаты получены автором лично, либо при его непосредственном участии. Все представленные экспериментальные данные получены автором лично, либо при его непосредственном участии. Анализ экспериментальных результатов исследования полосы (7—0) CO и разработка соответствующего программного обеспечения выполнены автором лично. Автору принадлежит

определяющий вклад в постановку и проведение экспериментальных и численных исследований, а также в интерпретации результатов.

Научная новизна и основные результаты диссертационного исследования

В ходе выполнения данной диссертационной работы, достигнут ряд значимых результатов:

1. Создан резонаторный спектрометр, работающий в видимом (707—687 нм) диапазоне длин волн с чувствительностью по поглощению $1.1 \cdot 10^{-9} \text{ см}^{-1}/\text{с}^{1/2}$.
2. Разработаны методики исследования спектров с относительно низким отношением сигнала к шуму, позволяющие проводить анализ формы линий с учётом зависимости сечения столкновительной релаксации от скорости молекул.
3. Разработано программное обеспечение, для одновременного анализа экспериментальных спектров, получаемых при различных давлениях газа, с помощью широко используемых профилей линий и учитывающее особенности работы спектрометра.
4. Проведены исследования линий шестого обертона колебаний молекулы СО, до этого ранее не обнаруженного экспериментально, но предсказанного теоретически. Определены частоты и интенсивности линий и их столкновительные параметры.
5. Проведено исследование формы первых двух чисто вращательных переходов молекулы СО при повышенных (близких к атмосферному) давлениях. Уточнены столкновительные параметры линий. Впервые измерены коэффициенты интерференции линий и под линиями обнаружено нерезонансное поглощение.

Степень достоверности результатов проведенных исследований

Достоверность полученных результатов подтверждается их согласием с известными теоретическими представлениями и результатами предшествующих экспериментальных исследований. Уверенность в непротиворечивости результатов основана на их широком обсуждении в кругу профессионалов, специализирующихся в данной области науки. В частности, результаты исследования полосы (7—0) СО обсуждались на семинарах отдела в университете Николая Коперника. Результаты исследования вращательных переходов СО обсуждались на семинарах Отдела Микроволновой спектроскопии ИПФ РАН и на международных конференциях, включая «The 26th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy (PRAHA2022)», «The 32nd International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC2021)», «The 27th Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy (COLOGNE2021)», «The 26th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy (DIJON2019)» и «XIX Symposium on High Resolution Molecular Spectroscopy (HighRus-2019)».

Практическая и теоретическая значимость результатов исследования

Полученные в ходе данной работы результаты заложили основу для продвижения по пути развития физически обоснованного моделирования поглощения в газах. В плане моделирования резонансного поглощения, результаты измерений интенсивностей линий шестого обертона СО были использованы для валидации новейших теоретических

глобальных *ab initio* расчётов интенсивностей колебательно-вращательных линий молекул. Стали ясными дальнейшие шаги, ведущие к полному решению проблемы расчета интенсивностей линий для всех полос молекулы CO с погрешностью не хуже, чем погрешность эксперимента. Измерения в диапазоне первых двух чисто вращательных линий CO позволили уточнить их столкновительные параметры, и впервые измерить параметр интерференции линий, необходимый для моделирования спектра при давлениях близких к атмосферному. Исследования спектров этих линий при повышенных давлениях показали, что сумма профилей резонансных линий CO не позволяет полностью описать наблюдаемое поглощение. Под линиями впервые было обнаружено континуальное поглощение. Зарегистрированные спектры континуального поглощения будут использованы для валидации развиваемых методов расчета бимолекулярного поглощения, а также для уточнения поведения дальних крыльев профиля линии при больших отстройках частоты от центра.

Список работ, опубликованных в журналах из Перечня рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук

1. CO-Ar collisions: *ab initio* model matches experimental spectra at a sub percent level over a wide pressure range / E. Serov [и др.] // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.* – 2021. – т. 272. – с. 107807. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2021.107807.
2. Pure rotational R(0) and R(1) lines of CO in Ar baths: experimental broadening, shifting and mixing parameters in a wide pressure range versus *ab initio* calculations / M. Y. Tretyakov [и др.] // *Phys. Chem. Chem. Phys.* – 2023. – т. 25, вып. 2. – с. 1310-1330. – DOI: 10.1039/D2CP04917A.
3. Measurement and calculation of CO (7-0) overtone line intensities / A. Balashov [и др.] // *J. Chem. Phys.* – 2023. – DOI: 10.1063/5.0152996. – Accepted in volume 158.

Работа представляет высокую научную ценность, поскольку автором получена неизвестная ранее информация, необходимая для развития фундаментальных основ молекулярной спектроскопии и для ее приложений. Материалы диссертации достаточно полно изложены в работах, опубликованных автором. Ссылки на отдельные результаты, в том числе работы, выполненные аспирантом в соавторстве, оформлены корректно.

Научная специальность, которой соответствует диссертация: 1.3.4. Радиофизика.

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

Диссертация соответствует критериям, установленным в соответствии с Федеральным законом Российской Федерации от 23 августа 1996 года № 127-ФЗ "О науке и государственной научно-технической политике".

Диссертация «Высокоточные измерения формы линий монооксида углерода: спектральные проявления неидеальности газов» Балашова Александра Андреевича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности: 1.3.4. Радиофизика.

Настоящее заключение составлено на основании решения Ученого совета отделения нелинейной динамики и оптики по проведению итоговой аттестации по программам

подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре по научной специальности: 1.3.4. Радиофизика.

Присутствовало на заседании 17 чел.

Результаты голосования: «за» — 17 чел., «против» — 0 чел., «воздержалось» — 0 чел.

протокол № 10 от « 29 » июня 2023 г.



Коржиманов Артем Владимирович,
кандидат физико-математических наук,
Учёный секретарь отделения нелинейной динамики
и оптики, зам.зав.отделом 330