

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИПФ РАН,
академик РАН Г.Г. Денисов



«09» апреля 2024 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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

по диссертации Королевой (Зибаровой) Александры Олеговны «Спектроскопия водяного пара в дальнем и ближнем ИК диапазонах для атмосферных приложений: линии и континуум» 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 2020 г. соискатель ученой степени окончила 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.

Сроки обучения в аспирантуре Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук»: с 1 сентября 2020 года по 30 июня 2024 года.

Свидетельство об окончании аспирантуры № 105200 00000013 от 9 апреля 2024 года.

В период подготовки диссертации соискатель Королева Александра Олеговна работала 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. Автор принимал участие в постановке задач исследования, выборе соответствующих экспериментальных условий, записи спектров и их

последующем анализе с целью получения параметров линий резонансного спектра в дальнем инфракрасном (ИК) диапазоне и континуального поглощения в ближнем ИК. Также автор внес определяющий вклад в обработку первичных данных, содержащих информацию о континууме водяного пара в дальнем ИК и резонансном спектре в ближнем ИК.

Научная новизна и основные результаты диссертационного исследования

В работе измерены центральные частоты и интенсивности 8400 резонансных линий молекулы H_2O в дальнем ($50\text{-}720\text{ см}^{-1}$) и ближнем ($8040\text{-}8630\text{ см}^{-1}$) ИК диапазонах, для 2000 резонансных линий - впервые. Полученная информация позволяет не только выявить большое количество ошибок в базе данных HITRAN, широко используемой для атмосферных приложений, но и впервые определить 79 энергий уровней молекулы воды, а также уточнить информацию о величине энергий уровней, известных ранее.

Полученная в работе экспериментальная информация о связанном с влажностью континууме для чистого водяного пара, а также влажного азота, кислорода и воздуха в дальнем и ближнем ИК диапазонах заполняет спектральные области, где предшествующие измерения отсутствовали ($200\text{-}350\text{ см}^{-1}$ и $8300\text{-}8500\text{ см}^{-1}$). Определенные в ходе анализа данных сечения поглощения собственного и стороннего континуума водяного пара служат для валидации MT_CKD. (Это единственная модель континуального поглощения, позволяющая рассчитать его во всем диапазоне колебательно-вращательного спектра водяного пара $0\text{-}20000\text{ см}^{-1}$). Результаты работы показывают, что модель MT_CKD завышает континуальное поглощение водяного пара на 30% в области его максимума в дальнем ИК диапазоне, и служат для валидации этой модели в ближнем ИК.

Показана необходимость совместного изучения резонансного спектра и континуального поглощения для создания физически обоснованной модели поглощения излучения атмосферой. Величина эмпирически определяемого континуального поглощения неотделима от параметров резонансного спектра, использованных для его получения, и точность извлеченной величины континуума на современном уровне развития теоретических методов и техники эксперимента определяется в основном неопределённостью параметров резонансного спектра. Для точного учёта резонансных линии необходимо отделить вклад их дальних крыльев от остальных составляющих континуума. Возможность такого разделения продемонстрирована в дальнем ИК диапазоне. Там на полученных экспериментальных данных о собственном континууме апробирована модель континуального поглощения, явным образом учитывающая все механизмы его формирования (к которым, кроме крыльев резонансных линий, относятся стабильные и метастабильные димеры).

В ближнем ИК диапазоне обнаружена спектральная особенность, интерпретированная как поглощение стабильного димера воды. Вместе с предшествующими наблюдениями аналогичных полос в других частотных диапазонах результаты работы позволяют заключить, что спектральные полосы, связанные с

поглощением излучения димерами водяного пара наблюдаются во всем значимом для радиационного баланса Земли частотном диапазоне ($0 - 10000 \text{ см}^{-1}$).

Степень достоверности результатов проведенных исследований

Для получения экспериментальных данных и их анализа использовались общепризнанные методы исследования, многократно апробированные различными научными коллективами в течение нескольких десятилетий на различных газах и их смесях.

Достоверность полученных результатов подтверждается согласием представленных результатов с предшествующими теоретическими и экспериментальными исследованиями (при их наличии). Данные о континуальном поглощении демонстрируют ожидаемые зависимости от давления. В обоих рассматриваемых частотных диапазонах сторонний континуум влажного воздуха складывается из стороннего континуума влажных азота и кислорода (с учетом концентраций этих газов в воздухе), что говорит об общей согласованности результатов.

Практическая и теоретическая значимость результатов исследования

Полученные данные позволяют уточнить и дополнить информацию о параметрах спектров поглощения водяного пара, широко используемую для атмосферных и астрофизических приложений (списки линий HITRAN и W2020, а также модель континуума MT_CKD). Они могут быть использованы для развития теоретических методов современной спектроскопии, большинство из которых непосредственно опирается на экспериментальные результаты, а методы, основанные на расчётах из первых принципов, нуждаются в высокоточных данных для валидации результатов своих предсказаний.

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. Tretyakov M.Yu., Zibarova A.O. On the problem of high-accuracy modeling of the dry air absorption spectrum in the millimeter wavelength range // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 2018. – V. 216. – P. 70—75.
2. Odintsova T.A., Tretyakov M.Yu., Zibarova A.O., Pirali O., Roy P., Campargue A. Far-infrared self-continuum absorption of H_2^{16}O and H_2^{18}O ($15\text{-}500 \text{ см}^{-1}$) // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 2019. – V. 227. – P. 190-200.
3. Koroleva A.O., Odintsova T.A., Tretyakov M.Yu., Pirali O., Campargue A. The foreign-continuum absorption of water vapour in the far-infrared ($50\text{-}500 \text{ см}^{-1}$) // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf. – 2021. – V. 261. – P. 107486.

4. Odintsova T.A., Koroleva A.O., Simonova A.A., Campargue A., Tretyakov M.Yu. The atmospheric continuum in the “terahertz gap” region (15–700 cm⁻¹): Review of experiments at SOLEIL synchrotron and modeling // *J. Mol. Spectrosc.* – 2022. – V. 386. – P. 111603.
5. Galanina T.A., Koroleva A.O., Simonova A.A., Campargue A., Tretyakov M.Yu. The water vapor self-continuum in the “terahertz gap” region (15–700cm⁻¹): Experiment versus MT_CKD-3.5 model // *J. Mol. Spectrosc.* – 2022. – V. 389. – P. 111691.
6. Toureille M., Koroleva A.O., Mikhailenko S.N., Pirali O., Campargue A. Water vapor absorption spectroscopy in the far-infrared (50-720 cm⁻¹). Part 1: Natural water // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* – 2022. – V. 291. P. 108326.
7. Koroleva A.O., Kassi S., Campargue A. The water vapor self-continuum absorption at room temperature in the 1.25 μm window // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* – 2022. – V. 286. – P. 108206.
8. Koroleva A.O., Kassi S., Mondelain D., Campargue A. The water vapor foreign continuum in the 8100-8500 cm⁻¹ spectral range // *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* – 2023. – V. 296. – P. 108432.
9. Koroleva A.O., Mikhailenko S.N., Kassi S., Campargue A. Frequency comb-referenced cavity ring-down spectroscopy of natural water between 8041 and 8633 cm⁻¹// *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* – 2023. – V. 298. – P. 108489.

Ценность научных работ аспиранта отражается высоким уровнем публикаций в рецензируемых международных журналах и призовыми местами на конкурсах студенческих докладов, а также конкурсах молодых специалистов ИПФ РАН. Они неоднократно обсуждались на различных конференциях и семинарах и получили высокую оценку ведущих специалистов.

Результаты, представленные в диссертационной работе, в полной мере изложены в работах, опубликованных соискателем ученой степени. Формулировки результатов изложены в соответствии с личным вкладом автора в каждую из опубликованных статей. Ссылки на источники заимствования материалов 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 «Спектроскопия водяного пара в дальнем и ближнем ИК диапазонах: линии и континуум» Королевой (Зибаровой) Александры Олеговны 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 ИПФ РАН по проведению итоговой аттестации по


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

Присутствовало на заседании 15 чел.

Результаты голосования: «за» — 15 чел., «против» — 0 чел., «воздержалось» — 0 чел.
протокол № 3 от « 12 » марта 2024 г.



Стародубцев Михаил Викторович,
доктор физико-математических наук,
Председатель Ученого совета отделения
нелинейной динамики и оптики



Шилягин Павел Андреевич,
кандидат физико-математических наук,
Учёный секретарь отделения нелинейной динамики
и оптики, зам. зав. отделом 340