

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор
Федерального
государственного бюджетного
учреждения науки
Институт физики атмосферы им.
А.М. Обухова РАН,
академик Семенов В.А.



2024 г.

Официальный отзыв ведущей организации

на диссертационную работу Королевой Александры Олеговны
«Поглощение водяного пара в дальнем и ближнем ИК диапазонах
для атмосферных приложений: линии и континуум»,
представленную на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук по специальности 1.3.4. – радиофизика

Диссертация А.О. Королевой посвящена исследованию поглощательной способности водяного пара, основного парникового газа в земной атмосфере. Несмотря на продолжительную историю исследования спектральных характеристик водяного пара, насчитывающую уже много десятилетий, современный уровень понимания этой проблемы все еще далек от совершенства. В особенности это относится к проблеме так называемого континуального поглощения, что подтверждает актуальность темы диссертационной работы. В работе получены и проанализированы экспериментальные данные о спектрах водяного пара в двух важных для атмосферных приложений частотных диапазонах (15-720 и 8030 – 8620 см⁻¹).

Диссертация состоит из Введения, трех основных глав, Заключения и списка литературы. В первой главе обсуждаются подходы к моделированию спектра поглощения водяного пара, приводится информация о предшествующих экспериментальных исследованиях континуального поглощения, связанного с влажностью. Обсуждаются принципы работы двух спектрометров, применявшихся в данной работе для регистрации спектров (Фурье-спектрометр в дальнем ИК диапазоне и CRDS спектрометр в ближнем ИК).

Во второй главе представлены результаты экспериментального

определения центральных частот и интенсивностей более чем 8000 линий, около четверти из которых были экспериментально измерены впервые. Это позволило уточнить значения уровней энергии молекулы воды, причем положения 81 уровня энергии были определены впервые. Большое внимание уделено сравнению полученной информации с данными базы HITRAN и списка W2020. Записанные в ходе работы экспериментальные спектры позволили выявить большое количество неточностей в этих источниках информации, рекомендованных к использованию для атмосферных и астрофизических приложений. Представленные в диссертации результаты уточняют и дополняют данные, имеющиеся в спектроскопических базах.

В третьей главе суммируются результаты четырех серий измерений континуального поглощения водяного пара. Экспериментальное изучение слабого континуального поглощения – трудная задача, поскольку извлекаемые параметры континуума сильно зависят от точности описания резонансного спектра. В настоящей работе уделено внимание возможным источникам ошибок, связанным как с техникой эксперимента (например, стабильность базовой линии и давления), так и с обработкой данных (адекватность модели резонансного спектра). В рассматриваемых в работе спектральных диапазонах частот имеются области, характеристики континуума водяного пара в которых получены впервые. В дальнем ИК диапазоне результаты работы были использованы для обновления модели MT_CKD, широко используемой для атмосферных приложений, что привело к уменьшению референсного собственного континуума H_2O модели MT_CKD на 30% в области его максимума. Это уточнение получило высокую оценку со стороны ведущих мировых специалистов. Полученные данные о собственном континууме водяного пара были использованы для построения прототипа физически обоснованной модели континуума водяного пара в дальнем ИК диапазоне, учитывающей все механизмы формирования континуума. В ближнем ИК диапазоне был подтвержден вклад поглощения димера воды в наблюдаемый континуум.

В Заключение сформулированы основные результаты диссертационной

работы.

Диссертационную работу А.О. Королевой безусловно можно характеризовать, как высокопрофессиональное научное исследование. К сожалению, текст диссертации не свободен от недостатков, в незначительной степени относящихся к существу излагаемых вопросов, но в большинстве случаев связанных с небрежностью формулировок или банальным опечаткам. Приведем лишь некоторые примеры:

Стр. 3 «...максимум исходящего от Земли теплового излучения приходится на ТГц диапазон (0.3 – 3 ТГц или 1 – 100 см-1).» Хорошо известно, что максимум теплового излучения поверхности Земли находится вблизи 1000 см-1 (приблизительно 30 ТГц).

Стр. 11 «Вириальные коэффициенты являются неявными множителями, входящими в амплитуды соответствующих спектров.» Даже если считать, что речь идет о вириальном разложении коэффициента поглощения, данное утверждение не совсем корректно.

Стр. 15 «Поведение крыльев линий до сих пор не посчитано из первых принципов.» Поведение чего бы то ни было нельзя посчитать.

Стр. 18 «...полная энергия ...больше "нулевой" энергии (энергии взаимодействия двух мономеров, разделенных бесконечным расстоянием).» Понятие «нулевой» энергии хорошо определено в квантовой теории. В данном случае употребление этого термина не совсем корректно.

Стр. 21 «В этой формуле KF - константа равновесия свободных пар.» Константа равновесия не определена для свободных пар, в отличие от связанных и метастабильных пар. Здесь, конечно, интересно было бы познакомиться с мнением автора по поводу того, в какой степени поглощение свободных пар коррелирует с поправками к поглощению в области крыльев резонансных линий, имеющими ту же квадратичную зависимость от плотности газа.

Сделанные замечания, разумеется, не меняют в целом положительного заключения о качестве проделанной работы и изложения полученных результатов.

Достоверность результатов исследования обеспечивается применением проверенных методик измерения и обработки данных, а также согласием результатов с предшествующими исследованиями (при их наличии).

Автореферат диссертации полностью отражает ее содержание. Все основные результаты работы опубликованы в отечественной и в зарубежной печати и прошли апробацию на всероссийских и международных конференциях.

Результаты работы представляют интерес для фундаментальной науки и приложений. Их целесообразно использовать в ИОА им. В.Е. Зуева СО РАН, ИФА им. А.М. Обухова РАН, Институте прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова РАН, Институте спектроскопии РАН, Санкт-Петербургском государственном университете, Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова, Томском политехническом университете.

Диссертационная работа была рассмотрена и обсуждена на заседании научного семинара в ИФА им А.М. Обухова РАН.

Диссертация А.О. Королевой представляет собой законченную научно-исследовательскую работу на актуальную тему. Новые научные результаты, полученные диссертантом, достаточно обоснованы и имеют очевидное приложение для атмосферной физики. Работа отвечает требованиям действующего «Положения о порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, А. О. Королева, безусловно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.4 – радиофизика.

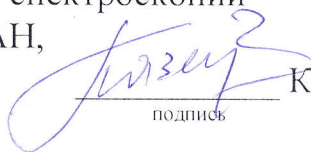
Отзыв составил:

ведущий научный сотрудник

Лаборатории атмосферной спектроскопии

ИФА им. А.М. Обухова РАН,

доктор физ.-мат. наук



подпись

Казиков Константин Вячеславович

Подпись К.В. Казакова заверяю:

Ученый секретарь ИФА им. А.М. Обухова РАН,

к.г.н.



Л.Д. Краснокутская

Сведения о ведущей организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики атмосферы им. А.М.Обухова Российской академии наук (ИФА им. А.М. Обухова РАН)

119017, Москва, Пыжевский пер., 3

Тел: +7 (495) 951-55-65

Факс: +7 (495) 953-16-52

E-mail: ifaran@ifaran.ru

<http://ifaran.ru/index.html>

Ученый секретарь ИФА им. А.М. Обухова РАН,

К.Г.Н.



Л.Д. Краснокутская

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ
сотрудников Института физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН

близких к тематике диссертации Королевой А.О. «Спектроскопия водяного пара в дальнем и ближнем ИК диапазонах для атмосферных приложений: линии и континуум» в рецензируемых научных изданиях за последние 5 лет

№ п/п	Наименование работы	Форма работы (статья/ доклад/ тезисы)	Выходные данные: издание, том, номер, год, страницы, индексация в базе данных (при наличии)	Объем, стр.	Соавторы
Публикации в изданиях, индексируемых в международных базах данных (Web of Science, Scopus и др.)					
1	Unveiling the force of weak effects in molecular absorption	статья	Journal of molecular spectroscopy, Vol. 397, 2023, P. 111841	11	Kazakov K.V., Vigasin A.A.
2	Trajectory-based Simulation of Far-infrared Collision-induced Absorption Profiles of CH ₄ -N ₂ for Modeling Titan's Atmosphere	статья	The Astrophysical Journal Supplement Series, Vol. 258, 2022, P. 33	13	Finenko A.A., Bézard B., Gordon I.E., Chistikov D.N., Lokshтанov S.E., Petrov S.V., Vigasin A.A.
3	The HITRAN2020 molecular spectroscopic database	статья	Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, Vol. 277, 2022, P. 107949	82	Gordon I.E., Rothman L.S., Finenko A.A.,... Vigasин A.A., et al.
4	Theory of rovibrational line intensities in allowed and collision-induced absorption spectra of linear molecules	статья	Phys. Rev. A, Vol. 104(4), 2021, P. 042805	11	Kazakov K.V., Vigasin A.A.
5	Simulation of collision-induced absorption spectra based on classical trajectories and ab initio potential and induced dipole surfaces. II. CO ₂ -Ar rototranslational band including true dimer contribution	статья	Journal of Chemical Physics, Vol. 155, 2021, P. 064301	17	Chistikov D.N., Finenko A.A., Kalugina Yu.N., Lokshтанov S.E., Petrov S.V., Vigasin A.A.
6	Breakdown of conventional rovibrational selection rules for field-or collision-induced absorption in symmetric linear molecules	статья	Phys. Rev. A, Vol. 102(2), 2020, P. 023104	8	Kazakov K.V., Vigasin A.A.
7	Simulation of collision-induced absorption spectra based on classical trajectories and ab initio potential and induced dipole surfaces. I. Case study of N ₂ -N ₂ rototranslational band	статья	Journal of Chemical Physics, Vol. 151, 2019, P. 194106	14	Chistikov D.N., Finenko A.A., Lokshтанov S.E., Petrov S.V., Vigasin A.A.
8	Continuum absorption of millimeter waves in nitrogen	статья	Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, Vol. 242, 2020, P. 106774	9	Serov E.A., Balashov A.A., Tretyakov M.Yu., Odintsova T.A., Koshelev M.A., Chistikov D.N., Finenko A.A., Lokshтанov S.E., Petrov S.V., Vigasin A.A.

9	Spectral composition of the water vapour self-continuum absorption within 2.7 and 6.25 μm bands	статья	Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, Vol. 228, 2019, P. 97	9	Ptashnik, I.V.; Klimeshina, T.E.; Solodov, A.A.; Vigasina, A.A.
10	Update of the HITRAN collision-induced absorption section	статья	Icarus, Vol. 328, 2019, P. 160	15	Karman T., Gordon I.E.,... Vigasina A.A. , et al.

Дата:

Гл. научн. сотр. ИФА им. А.М. Обухова РАН,
д.-ф.м.н.

А.А. Вигасин

Подпись заверяю:

Ученый секретарь ИФА им. А.М. Обухова РАН,
к.г.н.

Л.Д. Краснокутская

