

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА
на диссертационную работу Королевой Александры Олеговны
«Спектроскопия 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 Александры Королевой посвящена исследованию некоторых интересных и еще не до конца изученных аспектов, касающихся спектра поглощения водяного пара. В ней обсуждаются как спектральные линии H_2O , так и так называемое *континуальное* поглощение водяного пара. Хотя представленные в работе экспериментальные данные получены только в двух довольно узких спектральных интервалах в дальнем и ближнем ИК диапазонах, в них рассматриваются фундаментальные аспекты спектроскопии водяного пара – самого важного парникового газа в атмосфере Земли – и поэтому работа имеет важное фундаментальное и прикладное значение.

Диссертация состоит введения, трех глав и заключения. Первая посвящена рассмотрению теоретических и экспериментальных основ, на которых базируется данная работа. Кратко обсуждаются основные современные представления о поглощении электромагнитного излучения водяным паром и два метода его измерения – резонаторная и фурье-спектроскопия (CRDS иFTS). Рассмотрены современные принципы интерпретации континуального поглощения водяного пара.

Во второй части работы описывается методика определения параметров спектральных линий водяного пара по спектрам поглощения, записанным с высоким разрешением в дальнем ИК-диапазоне ($50\text{--}720\text{ cm}^{-1}$, с помощью фурье-спектрометра и с использованием синхротронного излучения в качестве источника) и в ближнем ИК (в диапазоне частот $8040\text{--}8633\text{ cm}^{-1}$, с помощью методов CRDS-спектроскопии). Измерения и их анализ проводились для различных изотопологов молекулы воды, при разных давлениях и с различным спектральным разрешением. Использовались современные методы калибровки частоты и спектроскопической проверки давления водяного пара во время измерений. В результате были скорректированы или впервые определены параметры нескольких тысяч спектральных линий водяного пара. В обеих спектральных областях измерения позволили выявить отклонения от баз данных HITRAN-2020 и W2020 и предоставили информацию для их уточнения.

Наконец, в третьей части представлены новые результаты измерений и анализа собственного и стороннего континуума водяного пара в дальнем и ближнем ИК диапазонах ($15\text{--}500\text{ cm}^{-1}$ и $8100\text{--}8620\text{ cm}^{-1}$) при комнатной температуре. Помимо интересных фундаментальных аспектов этих результатов, полученные данные позволили подтвердить достоверность последних версий модели MT_CKD в одном спектральном диапазоне или использовались для ее уточнения в другом. Проанализированы возможные факторы, влияющие на неопределенность континуума. Кроме того, вблизи 8455 cm^{-1} наблюдалась дополнительная спектральная особенность, которая может быть отнесена к полосе связанных димеров воды.

В ходе этой работы автор активно участвовала в международном сотрудничестве с учеными из разных стран и специалистами в различных областях молекулярной спектроскопии, что, несомненно, способствовало ее всесторонней подготовке.

Будучи хорошо знакомым с основными статьями, ставшими основой диссертационной работы Александры Королевой, я должен подчеркнуть, что эта работа является блестящим экспериментальным и методологическим исследованием высокого уровня, на результаты которого уже ссылаются и будут ссыльаться специалисты из разных стран. Результаты могут быть использованы, в частности, в University College, London, Centre of Astrophysics, Harvard University, заинтересованных в параметрах линий для пополнения баз данных и EXOMOL HITRAN, а также в Институте физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН, Институте оптики

атмосферы им. В.Е. Зуева СО РАН, Институте прикладной физики РАН, на химическом факультете МГУ им. М.В. Ломоносова и т.д..

В диссертации представлено последовательное и подробное описание методов и инновационных экспериментальных разработок, используемых автором и его коллегами для достижения результатов международного качества и значимости. Почти все полученные результаты являются либо совершенно новыми, либо превосходят по точности результаты предыдущих измерений, иногда в принципиально-значимой степени. Выводы и положения диссертационной работы убедительно аргументированы. Автореферат диссертации полностью отражает ее содержание.

Чтобы не быть приторно позитивным, после прочтения диссертации можно отметить пару небольших недостатков:

– В третьей части диссертации автор отметил, что расчеты спектра димеров воды с помощью [Scribano&Leforestier, 2007] в диапазоне частот 0-600 см⁻¹ подтверждены [Lee et al., 2008] с более надежным молекулярно-динамического подходом. С этим трудно согласиться, поскольку результаты [Lee et al., 2008] отличаются от расчетов [Scribano&Leforestier, 2007] в 1,5–2 раза в некоторых спектральных интервалах в среднем и дальнем ИК-диапазоне (см., например, рис. 10 в Ptashnik et al. JQSRT-2011). Таким образом, в этом спектральном диапазоне неопределенность в расчетах спектра димеров воды на сегодняшний день остается еще очень высокой.

– После довольно подробного описания погрешностей определения континуального поглощения водяного пара из экспериментальных спектров было бы неплохо подвести итог, что основной источник погрешности внутри полос поглощения водяного пара связан с неопределенностью в знании параметров спектральной линии, в то время как в окнах прозрачности это в основном связано с погрешностями эксперимента (шумом или нестабильностью базовой линии).

Однако эти замечания носят в основном "семантический" характер и не умаляют общей значимости и высокого уровня диссертации. Работа отвечает требованиям действующего «Положения о порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.4 – радиофизика.

Выражаю свое согласие на обработку моих персональных данных, связанных с защитой диссертации Королевой А.О.

Член-корреспондент РАН,
доктор физ.-мат. наук,
директор Института оптики атмосферы
им. В.Е. Зуева, СО РАН,

Пташник Игорь Васильевич

«17» апреля 2024 г.



Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт оптики атмосферы им. В.Е. Зуева
Сибирского отделения Российской академии наук,
634055, Россия, г. Томск, пл. Академика Зуева, 1
e-mail: piv@iao.ru, моб.: +7 913-806-26-41