

ОТЗЫВ

председателя диссертационного совета **Тимофеева Николая Александровича** на диссертацию **Катаевой Татьяны Сергеевны** на тему «**Исследование спектров отражения/поглощения низкотемпературных молекулярных жидкостей и кристаллов**», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности **1.3.6. Оптика**.

Исследование спектров низкотемпературных молекулярных жидкостей и кристаллов представляет большой интерес как для прикладной физики атмосферы и астрофизики, так и для фундаментальной теории жидкостей и кристаллов. Молекулы, которые имеют колебания, которым соответствуют сильные полосы поглощения в ИК области, относятся к молекулам, входящих в состав парниковых газов, что чрезвычайно важно для атмосферной физики и проблем экологии. Диссертационная работа **Катаевой Татьяны Сергеевны** посвящена исследованию контуров полос сильных в дипольном поглощении в конденсированных системах, а также контуров составных полос с участием колебаний, чьи полосы являются сильными в дипольном поглощении. При этом в качестве объектов исследования выбраны вещества (C_2F_6 , SF_6 , CO_2), которые критичны с точки зрения экологической проблематики. Безусловно, тема диссертационной работы является **актуальной** и востребованной особенно в настоящее время.

Целью представленного исследования является проведение измерений контуров полос в спектре экстинкции, полученных из RAIR спектров конденсированных молекулярных систем, а также сравнение экспериментальных и расчетных данных для контуров полос в спектре экстинкции, полученных из RAIR спектров конденсированных молекулярных систем. Для решения поставленной задачи была разработана и применена методика регистрации ИК спектров отражения и поглощения.

К результатам, полученным в данной работе **впервые**, можно отнести следующие:

- разработана новая методика нормировки по высокочастотному крылу полосы отражения в спектрах кристаллов;
- предложена методика восстановления контуров полос, сильных в дипольном поглощении, в спектре экстинкции по соответствующим полосам отражения; методика апробирована на примере C_2F_6 в конденсированных фазовых состояниях для полос ν_5 и ν_{10} ;
- автором впервые выдвинуто предположение о соотношении величин вторых спектральных моментов фундаментальных полос и полос составных с ними;

- обнаружена зависимость эволюции контуров полос от вкладов механизмов, формирующих полосу; автором найдено три типа поведения полосы, в зависимости от влияния различных механизмов.

В качестве безусловных достоинств работы отметим следующее. Это, прежде всего, наличие хорошо поставленного эксперимента с использованием современной физической аппаратуры. Фурье-спектрометр Bruker IFS 125 HR есть, безусловно, не у всех, но автор, имея такой прибор в своем распоряжении, в полной мере воспользовался его возможностями. Используемая методика была апробирована на ряде сильных полос C_2F_6 и показала свою эффективность. Далее, обнаружена связь эволюции контуров полос при фазовых переходах от соотношения вкладов механизмов, формирующих эти полосы. При этом автор нашел три типа полос, ведущих себя по-разному при фазовых переходах. В-третьих, выдвинуто интересное предположение о соотношении величин вторых спектральных моментов фундаментальных полос и полос составных с ними. Также следует отметить метод определения толщины тонких пленок на металлических поверхностях спектроскопическими методами.

Несмотря на хорошее впечатление от работы в целом, есть два замечания.

1. С моей точки зрения, изложение материала диссертации не вполне адекватно полученным результатам. Работа большая, проведены и экспериментальные и теоретические исследования. Но во «Введении» диссертации, с моей точки зрения, недостаточно четко прослеживается «экспериментальный фактор» и его результаты: эксперимент есть, установка есть (и она в определенной степени уникальна), но это можно понять только из главы «Эксперимент». Есть «скромное» упоминание о «регистрации и интерпретации RAIR спектров изучаемых веществ...» в формулировке целей работы, есть упоминание о регистрации экспериментальных RAIR спектров низкотемпературных молекулярных кристаллов и жидкостей в разделе новизны, но в основных результатах «Введения» упоминание об эксперименте и его результатах отсутствует. Это обедняет диссертацию. Следует помнить, что многие, читая диссертации, ограничиваются только «Введением». Не надо стесняться описывать то, что сделано, и сделано хорошо. В качестве оправдания автора диссертации можно отметить исчерпывающее представление результатов работы в «Выводах».
2. Работа изобилует орфографическими и стилистическими ошибками. Суть представленного материала это не портит, но портит общее впечатление.

Сделанные замечания не носят принципиального характера и не влияют на общее положительное впечатление о работе. Достоверность результатов, их научная и практическая значимость не вызывают сомнений, работа выполнена на высоком научном уровне, соответствующем современным стандартам. Результаты диссертации докладывались на международных и российских конференциях, по теме работы опубликованы пять статей в журналах, индексируемых в международных базах данных Web of Science Core Collection и Scopus.

Диссертация Катаевой Татьяны Сергеевны на тему: «Исследование спектров отражения/поглощения низкотемпературных молекулярных жидкостей и кристаллов» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Катаева Татьяна Сергеевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.6. Оптика. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не обнаружены.

Председатель диссертационного совета
доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой оптики



Н.А. Тимофеев

22.09. 2022 г.