

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Распоповой Натальи Ивановны  
«Теоретическое исследование спектров молекул типа сферического волчка на основе  
формализма неприводимых тензорных систем», представленной на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 - оптика

Колебательно-вращательные спектры представляют собой уникальный источник информации о структуре и внутренних свойствах молекул. Однако, до последнего времени теоретические методы описания процессов межмолекулярного взаимодействия существенно отставали от возможностей современного эксперимента, в первую очередь, вследствие проблем, возникающих на пути реализации используемых в колебательно-вращательной спектроскопии методов описания внутренней динамики многоатомных молекул. С этой точки зрения, особое место занимают молекулы типа сферического волчка, корректное описание энергетической колебательно-вращательной структуры которых требует использования специальных теоретических методов и подходов.

Диссертация Распоповой Н.И. посвящена решению проблем современной теоретической спектроскопии, возникающих при исследовании колебательно-вращательных спектров высокого разрешения многоатомных молекул, связанных с наличием высокой симметрии рассматриваемого объекта. Автором разработан подход, позволяющий в аналитическом виде описывать тонкую энергетическую структуру не только низколежащих, но и высоковозбужденных колебательно-вращательных состояний молекул высокой симметрии. Предложенный подход, реализован в виде алгоритмов и пакета компьютерных программ, который позволяет упростить сложный процесс интерпретации спектров молекул типа сферического волчка. На основе созданного пакета программ впервые выполнено исследование реальных спектров высокого разрешения различных изотопологов молекул  $\text{SiH}_4$  и  $\text{GeH}_4$  в широких спектральных диапазонах.

Исследование всех рассмотренных в диссертации вопросов выполнено на высоком научном уровне, результаты являются новыми. Достоверность результатов и выводов не вызывает сомнений.

На основе представленных в автореферате сведений, можно сделать вывод о том, что диссертация Распоповой Н.И. является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на высоком научном уровне. Все результаты работы опубликованы в ведущих рецензируемых журналах и представлены на конференциях различного уровня.

В качестве замечаний следует отметить следующие:

1. На стр.7 автореферата при оценке достоверности во втором утверждении автор ссылается на самого себя, т.е. автор указывает на «соответствие результатов теоретических исследований результатам, полученным впервые в рамках данного исследования».

2. В 3-м пункте научной новизны автор говорит о созданном пакете программ SPHETOM, однако документальное подтверждение в виде свидетельства о государственной регистрации пакета программ для ЭВМ в «Фонде алгоритмов и программ» в автореферате отсутствует.

Указанные замечания не снижают ценности диссертации, которая представляет собой законченное исследование, соответствующее заявленной специальности, удовлетворяющее требованиям ВАК. Считаю, что автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 - оптика.

Профессор кафедры автоматизированных  
систем управления ТУСУР,  
доктор технических наук

Подпись А. А. Мицеля заверено  
Ученый секретарь ТУСУР  
25.09.2018 г.



А.А. Мицель

(Мицель Артур Александрович)

Е.В. Прокопчук

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники,  
634050, г. Томск, проспект Ленинский, 40, тел. (3822)701-536, e-mail: [maa@asu.tusur.ru](mailto:maa@asu.tusur.ru)  
(3822) 510-530; [office@tusur.ru](mailto:office@tusur.ru); [www.tusur.ru](http://www.tusur.ru)