

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Распоповой Натальи Ивановны**

«Теоретическое исследование спектров молекул типа сферического волчка на основе формализма неприводимых тензорных операторов» по специальности 01.04.05 - оптика

Достоверная трактовка экспериментально наблюдаемых молекулярных спектров, в частности, колебательно-вращательных, в значительной степени опирается на теоретические расчеты. Однако существуют известные и до сих пор не решенные проблемы, связанные с корректным построением гамильтониана для многоатомной молекулы и последующим решением соответствующего уравнения Шредингера. Поэтому использование полуэмпирических методов, основанных на применении экспериментальных данных современной молекулярной спектроскопии высокого разрешения для определения фундаментальных характеристик молекулы, является вынужденным, но необходимым средством теоретического описания спектральных свойств молекул.

Диссертационная работа Распоповой Н.И. посвящена разработке теоретического метода расчета колебательно-вращательной структуры спектров молекул типа сферического волчка с использованием математического аппарата теории неприводимых тензорных систем. Метод позволяет в аналитическом виде детально описывать такие структуры и, тем самым, отчасти решает вышеупомянутые проблемы, что подтверждает актуальность и новизну выполненных Распоповой Н.И. исследований. Важно, что метод доведен автором до практической реализации в виде алгоритма и пакета программ, позволяющего рассчитывать спектры высокого разрешения для различных полиад взаимодействующих колебательных состояний, верно интерпретировать колебательно-вращательные спектры высокого разрешения и решать обратную спектроскопическую задачу. С использованием этого пакета в работе выполнен анализ спектров поглощения молекул SiH_4 и GeH_4 для взаимодействующих состояний диады и пентады. Исследованные молекулы силана и германа находят широкое применение в различных областях науки и техники: астрофизики, планетологии, задач физической химии, микроэлектроники и многих других. Поэтому полученные результаты, несомненно, имеют научную и практическую ценность.

Актуальность темы, научная новизна и ценность полученных результатов, их достоверность не вызывают сомнения. Все результаты достаточно широко представлены в отечественной и мировой печати, прошли апробацию на международных конференциях.

Содержание и объём проделанных исследований позволяют сделать вывод, что диссертационная работа Распоповой Н.И. удовлетворяет требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 - оптика.

Килин Виктор Андреевич



профессор отделения математики и информатики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»,
доктор физико-математических наук, профессор

634050, Россия, г. Томск, проспект Ленина, 30,
тел. +7(3822) 60-63-33, факс. +7(3822) 60-64-44, tpu@tpu.ru

Подпись Килина В.А. заверяю,
Ученый секретарь Учёного совета НИ ТПУ

25.09.2018 г.




О.А. Ананьева