

ОТЗЫВ

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

Диссертация Н.И. Распоповой посвящена теоретическому исследованию тонкой колебательно-вращательной структуры спектров многоатомных молекул сферической симметрии типа XU_4 на основе формализма неприводимых тензорных величин и дальнейшему использованию полученных результатов для создания алгоритма и пакета программ для решения обратной спектроскопической задачи и расчета сложных колебательно-вращательных спектров высокого разрешения исследуемого класса молекул, выполненного на примере молекул силана и германа.

Актуальность. Тема диссертации, ее задачи интересны, с практической точки зрения, многочисленными приложениями для различного рода задач астрофизики, химической физики, атмосферной оптики, газоанализа и многих других. Теоретический интерес связан с необходимостью создания новых подходов, позволяющих аналитически описывать энергетическую колебательно-вращательную структуру спектров молекул типа сферического волчка, что, в свою очередь, требует использование специальных теоретических методов.

Результаты, полученные в диссертации, являются новыми и выделяют данную работу из совокупности аналогичных исследований тем, что:

- Автором разработан новый подход, позволяющий в аналитическом виде описывать сложную колебательно-вращательную структуру спектров высокого разрешения молекул типа сферического волчка.
- На основании данного подхода создан алгоритм и пакет программ для решения обратной спектроскопической задачи и расчета колебательно-вращательных спектров данного класса молекул в автоматическом режиме.

Работоспособность созданного пакета программ успешно проверена на примере молекул типа сферического волчка SiH_4 и GeH_4 . Более того, в рамках представленной диссертации для исследуемых молекул силана и германа выполнен анализ колебательно-вращательных спектров высокого разрешения в широких спектральных диапазонах, из которого получена новая высокоточная спектроскопическая информация.

Научная значимость и практическая ценность. Полученные в диссертационной работе Н.И. Распоповой аналитические выражения для матриц редукции, вращательных операторов и волновых функций позволяют определять в аналитическом виде величины тетраэдрических расщеплений для различных полиад взаимодействующих состояний. Эти расщепления создают основу для более детального понимания процессов, происходящих в молекулах типа XU_4 , и могут использоваться для новых исследований молекул такого класса. Развитый в диссертации подход

аналитического описания спектров молекул типа сферического волчка XU_4 , реализованный в виде алгоритмов и пакетов компьютерных программ, позволяет не только упростить процесс идентификации переходов с помощью теоретического расчета тонкой колебательно-вращательной структуры спектров, но и определять спектроскопические параметры молекул с точностью, близкой к экспериментальным погрешностям. Также практическая ценность работ заключается в улучшении, представленных в литературе и получении новых данных колебательно-вращательных спектров молекул силана и германа.

Достоверность полученных в диссертации теоретических результатов и рассчитанных спектральных характеристик исследуемых молекул не вызывает сомнений, поскольку все исследования, проводимые в диссертации, основаны на общеположениях и принципах теоретической колебательно-вращательной спектроскопии. Расчеты проведены квалифицированно и грамотно. Это подтверждается тем, что в частных случаях полученные диссертантом результаты совпадают с более ранними результатами других авторов. Достоверность полученных результатов подтверждается еще и тем, что они прошли экспертизу в международных журналах с высоким импакт-фактором и неоднократно докладывались на российских и международных конференциях.

Научная новизна результатов диссертации также несомненна. Автором впервые получены аналитические выражения для матриц редукции цепочки групп $SO(3) \rightarrow Td$, симметризованных волновых функций высоковозбужденных колебательных состояний, редуцированных вращательных операторов, а также величин тетраэдрических расщеплений. Впервые определены или значительно улучшены спектроскопические параметры, интенсивности и полуширины линий, параметры эффективного дипольного момента, коэффициенты самоуширения давлением линий спектров молекул SiH_4 и GeH_4 .

Содержание работы. Рецензируемая диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, двух приложений, заключения, списка использованной литературы из 115 наименований. По своему объему и структуре работа удовлетворяет требованиям, установленным для кандидатских диссертаций.

Во **введении** дано описание актуальности выбранной темы, поставлены цели и задачи диссертации, сформулированы защищаемые положения, научная и практическая значимость работы.

Первая глава диссертации посвящена описанию методов исследования многоатомных молекул, построения колебательно-вращательного гамильтониана произвольной молекулы, основным положениям теории неприводимых тензорных операторов, операторной теории возмущений, теории локальных мод. Данные сведения необходимы для изложения оригинальной части работы.

Вторая глава посвящена теоретическому исследованию особенностей колебательно-вращательной структуры спектров молекул типа сферического

волчка, созданию и реализации подхода, позволяющего определять тетраэдрические расщепления в аналитическом виде. В данной главе приводятся полученные в симметризованной форме волновые функции вплоть до девятой полиады взаимодействующих колебательных состояний и выражения для вращательных операторов, построенных на основе аналитического представления элементов матрицы редукции. На основе полученных результатов, создан пакет программ SPHETOM, позволяющий как производить расчеты спектров высокого разрешения для различных полиад взаимодействующих колебательных состояний, так и выполнять интерпретацию спектров и решать обратную спектроскопическую задачу для молекул тетраэдрической симметрии.

В третьей главе представлены результаты анализа, как положений, так и интенсивностей и полуширин линий колебательно-вращательных спектров высокого разрешения трехизотопологов молекулы силана ($^M\text{SiH}_4$, $M=28,29,30$) в районе сильновзаимодействующих полос диады и двух полос пентады, соответствующих валентным колебаниям, полученные на основе разработанного подхода и созданного пакета компьютерных программ.

Четвертая глава посвящена исследованию тонкой структуры спектров молекул $^M\text{GeH}_4$ ($M=74,76$) в диапазоне полос диады, пентады, полос $2\nu_1$ и $\nu_1+\nu_3$, а также «горячих» полос лежащих в области полос диады. В результате, в совокупности проинтерпретировано более 10,5 тысяч переходов, что соответствует порядка 5 тысячам колебательно-вращательных энергий. На этой основе из решений обратных спектроскопических задач определены спектроскопические параметры основного и исследуемых колебательных состояний молекулы GeH_4 .

Общие итоги работы представлены в **заключении**. Они соответствуют заявленным целям и задачам исследования, характеризуют научную новизну и практическую значимость работы.

По содержанию и оформлению работы можно сделать следующие **замечания**:

1. Диссертация не лишена грамматических ошибок по согласованию падежей и опечаток в формулах, в частности разного количества открывающих и закрывающих скобок (формула (1.5.24)). Некоторые формулы занимают несколько страниц (49 – 54) и могли быть перенесены в приложение. Некоторые сокращения (ВМПФ) не объяснены.

2. Среди молекул сферической симметрии XH_4 первое место и по порядку и по важности занимает метан – CH_4 . В диссертации упоминается, что метан исследуется вариационными и квантово химическими методами. В тоже время подход, разработанный в диссертации применим как для силана и германа, так и для метана. Позволяет ли новый подход воспроизводить полученные ранее результаты для молекулы метана? Какие методы, аналитические или вариационные более перспективны для исследования высоко возбужденных состояний сферических молекул? Эти вопросы в диссертации не рассмотрены.

Сделанные замечания не снижают важности полученных результатов и общей положительной оценки диссертационной работы, которая представляет собой законченное научное исследование, свидетельствующее о высокой научной квалификации автора.

Автореферат правильно и полностью отражает содержание диссертации.

Заключение. Считаю, что диссертационная работа «Теоретическое исследование спектров молекул типа сферического волчка на основе формализма неприводимых тензорных операторов» является законченным квалификационным научным исследованием и по содержанию полностью соответствует требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденных Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 N842 (ред. от 28.08.2017), предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор - Н.И. Распопова заслуживает присуждения искомой степени по специальности 01.04.05 - оптика.

Официальный оппонент
Зобов Николай Федорович
кандидат физико-математических наук
по специальности 01.04.03 - радиофизика,
старший научный сотрудник отдела микроволновой спектроскопии
Федерального государственного бюджетного научного учреждения
«Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики
Российской академии наук»
10 сентября 2018 г.
603950 г. Нижний Новгород, БОКС – 120,
ул. Ульянова 46.
E-mail: dir@appl.sci-nnov.ru
Тел.: (831) 436 62 02
<https://www.iapras.ru>

Подпись Н.Ф. Зобова заверяю
Ученый секретарь ИИФ РАН

10 сентября 2018 г.



И.В. Корюкин