

## СВЕДЕНИЯ О РЕЗУЛЬТАТАХ ПУБЛИЧНОЙ ЗАЩИТЫ ДИССЕРТАЦИИ

Диссертационный совет Д 212.267.04, созданный на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», извещает о результатах состоявшейся 27 сентября 2018 года публичной защиты диссертации Распоповой Натальи Ивановны «Теоретическое исследование спектров молекул типа сферического волчка на основе формализма неприводимых тензорных операторов» по специальности 01.04.05 – Оптика на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

На заседании присутствовали 18 из 25 членов диссертационного совета, в том числе 6 докторов наук по специальности 01.04.05 – Оптика:

- |  |          |
|--|----------|
| 1. Войцеховский А. В., доктор физико-математических наук, профессор, заместитель председателя диссертационного совета, | 01.04.05 |
| 2. Пойзнер Б. Н., кандидат физико-математических наук, профессор, учёный секретарь диссертационного совета,            | 01.04.03 |
| 3. Артюхов В. Я., доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник,  | 01.04.21 |
| 4. Дмитренко А. Г., доктор физико-математических наук, профессор,  | 01.04.03 |
| 5. Донченко В. А., доктор физико-математических наук, профессор,   | 01.04.21 |
| 6. Дунаевский Г. Е., доктор технических наук, профессор,   | 01.04.03 |
| 7. Кабанов М. В., член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор,                                | 01.04.05 |
| 8. Козырев А. В., доктор физико-математических наук, профессор,  | 01.04.03 |
| 9. Копылова Т. Н., доктор физико-математических наук, профессор,   | 01.04.21 |
| 10. Лосев В. Ф., доктор физико-математических наук, профессор,   | 01.04.21 |
| 11. Самохвалов И. В., доктор физико-математических наук, профессор,  | 01.04.05 |
| 12. Соколова И. В., доктор физико-математических наук, профессор,  | 01.04.21 |
| 13. Солдатов А.Н., доктор физико-математических наук, профессор,   | 01.04.21 |
| 14. Соснин Э.А., доктор физико-математических наук,  | 01.04.05 |
| 15. Тарасенко В.Ф., доктор физико-математических наук, профессор,  | 01.04.21 |
| 16. Улеников О. Н., доктор физико-математических наук, профессор,  | 01.04.05 |
| 17. Фисанов В. В., доктор физико-математических наук, профессор,   | 01.04.03 |
| 18. Черепанов В. Н., доктор физико-математических наук, доцент,  | 01.04.05 |

**В связи с невозможностью присутствия на заседании председателя диссертационного совета доктора физико-математических наук, профессора Майера Георгия Владимировича по его письменному поручению заседание провёл заместитель председателя диссертационного совета доктор физико-математических наук, профессор Войцеховский Александр Васильевич.**

По результатам защиты диссертации тайным голосованием (результаты голосования: за присуждение ученой степени – 17, против – нет, недействительных бюллетеней – 1) диссертационный совет принял решение присудить Н. И. Распоповой ученую степень кандидата физико-математических наук.

**Заключение диссертационного совета Д 212.267.04,  
созданного на базе федерального государственного автономного  
образовательного учреждения высшего образования  
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»  
Министерства образования и науки Российской Федерации,  
по диссертации на соискание учёной степени кандидата наук  
аттестационное дело № \_\_\_\_\_**

решение диссертационного совета от 27.09.2018 № 148

О присуждении **Распоповой Наталье Ивановне**, гражданину Российской Федерации, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация **«Теоретическое исследование спектров молекул типа сферического волчка на основе формализма неприводимых тензорных операторов»** по специальности **01.04.05** – Оптика принята к защите 07.06.2018 (протокол заседания № 139) диссертационным советом Д **212.267.04** , созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, приказ о создании диссертационного совета № 714/нк от 02.11.2012).

Соискатель **Распопова Наталья Ивановна**, 1990 года рождения.

В 2013 году соискатель окончила федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

В 2016 году соискатель очно окончила аспирантуру федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

Работает в должности ассистента исследовательской школы физики высокоэнергетических процессов федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре квантовой теории поля федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» и в исследовательской школе физики высокоэнергетических процессов федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, **Уленков Олег Николаевич**, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», исследовательская школа физики высокоэнергетических процессов, профессор (на момент назначения научным руководителем – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», кафедра оптики и спектроскопии, профессор).

Официальные оппоненты:

**Быков Александр Дмитриевич**, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт оптики атмосферы им. В. Е. Зуева Сибирского отделения Российской академии наук» лаборатория молекулярной спектроскопии, главный научный сотрудник.

**Зобов Николай Федорович**, кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук», отдел микроволновой спектроскопии, старший научный сотрудник.

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «**Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова**», г. Москва, в своём положительном отзыве, подписанном **Краснощековым Сергеем Вадимовичем** (доктор физико-математических наук, кафедра физической химии, ведущий научный сотрудник),

**Луниным Валерием Васильевичем** (доктор химических наук, академик РАН, профессор, кафедра физической химии, заведующий кафедрой), **Засурской Ларисой Александровной** (кандидат химических наук, кафедра физической химии, ученый секретарь, старший научный сотрудник) и **Зверевой Марией Эмильевной** (доктор химических наук, химический факультет, заместитель декана) указала, что изучение физико-химических свойств молекул типа сферического волчка, таких как  $\text{CH}_4$ ,  $\text{SiH}_4$ ,  $\text{GeH}_4$ , является актуальной задачей в связи с востребованностью в разных областях науки и техники. Н. И. Распоповой реализован подход, позволяющий в аналитическом виде описывать спектры молекул типа сферического волчка  $\text{XY}_4$ , который лег в основу созданного с участием автора диссертационной работы пакета программ SPHETOM, позволяющего в автоматическом режиме как производить расчеты спектров высокого разрешения для различных полиад взаимодействующих колебательных состояний, так и выполнять интерпретацию колебательно-вращательных спектров высокого разрешения и решать обратную спектроскопическую задачу; выполнен анализ экспериментально зарегистрированных спектров высокого разрешения различных изотопологов молекул  $\text{SiH}_4$  и  $\text{GeH}_4$  в широких спектральных диапазонах. Полученные результаты имеют важное значение для развития современной теоретической молекулярной спектроскопии высокого разрешения и могут быть использованы в различных задачах астрофизики, газоанализа, планетологии, физической химии, электронной промышленности. Разработанный с участием автора подход аналитического описания сложных колебательно-вращательных спектров молекул высокой симметрии позволяет проводить анализ высоковозбужденных состояний молекул типа сферического волчка и предсказывать поведение и внутреннюю динамику молекул с высокой точностью.

Соискатель имеет 26 опубликованных работ, в том по теме диссертации числе опубликовано 26 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 12 работ (из них 6 статей в зарубежном научном журнале, индексируемом Web of Science, и 5 статей в российских научных журналах, переводные версии которых индексируются Web of Science), в научных журналах опубликованы 2 работы,

в сборниках материалов международных и всероссийских научных конференций опубликованы 12 работ (из них 10 публикаций в сборниках материалов зарубежных конференций). Общий объем публикаций – 9,98 а.л., авторский вклад – 3,58 а.л.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем учёной степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации, опубликованные в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, на соискание учёной степени доктора наук:

1. Ulenikov O. N. High resolution study of  $^M\text{GeH}_4$  ( $M = 76, 74$ ) in the dyad region / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **N. I. Raspopova**, P. G. Sennikov, M. A. Koshelev, I. A. Velmuzhova, A. P. Velmuzhov, A. D. Bulanov // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2014. – Vol. 144. – P. 11–26. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2014.03.025. – 1.2 / 0.3 а.л. (*Web of Science*).

2. Бехтерева Е. С. Расчет колебательно-вращательной энергетической структуры молекул тетраэдрической симметрии типа  $XY_4$  / Е. С. Бехтерева, О. В. Громова, **Н. И. Распопова**, И. Б. Болотова, Ю. В. Кривчикова, К. Б. Берёзкин // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2014. – Т. 57, № 7. – С. 99–102. – 0.3 / 0.12 а.л.

*в переводной версии журнала, входящей Web of Science:*

Bekhtereva E. S. Calculation of the Vibrational-Rotational Energy Structure of Molecules with Tetrahedral Symmetry of the Type  $XY_4$  / E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, **N. I. Raspopova**, I. B. Bolotova, Y. V. Krivchikova, K. B. Berezkin // Russian Physics Journal. – 2014. – Vol. 57, is. 7. – P. 969–972. – DOI: 10.1007/s11182-014-0332-5.

3. Koshelev M. A. High resolution study of strongly interacting  $\nu_1(A_1)/\nu_3(F_2)$  bands of  $^M\text{GeH}_4$  ( $M = 76, 74$ ) / M. A. Koshelev, A. P. Velmuzhov, I. A. Velmuzhova, P. G. Sennikov, **N. I. Raspopova**, E. S. Bekhtereva, O. V. Gromova, O. N. Ulenikov // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2015. – Vol. 164. – P. 161–174. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2015.06.003. – 1.0 / 0.25 а.л. (*Web of Science*).

4. Ulenikov O. N. High resolution study of  $^M\text{SiH}_4$  ( $M=28, 29, 30$ ) in the Dyad Region: Analysis of line positions, intensities and half-widths / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **N. I. Raspopova**, N. V. Kashirina, A. L. Fomchenko, C. Sydow, S. Bauerecker // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2017. – Vol. 203. – P. 496–510. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.03.020. – 1.13 / 0.28 а.л. (*Web of Science*).

5. Ulenikov O. N. High resolution study of strongly interacting  $2\nu_1(A_1)/\nu_1+\nu_3(F_2)$  bands of  $^M\text{GeH}_4$  ( $M=76, 74$ ) / O. N. Ulenikov, O. V. Gromova, E. S. Bekhtereva, **N. I. Raspopova**, P. G. Sennikov, M. A. Koshelev, I. A. Velmuzhova, A. P. Velmuzhov, S. A. Adamchik // Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. – 2018. – Vol. 205. – P. 96–104. – DOI: 10.1016/j.jqsrt.2017.09.025. – 0.68 / 0.17 а.л. (*Web of Science*).

На автореферат поступило 4 положительных отзыва. Отзывы представили:

1. **В. А. Килин**, д-р физ.-мат. наук, проф., профессор отделения математики и информатики Национального исследовательского Томского политехнического университета, *без замечаний*. 2. **А. А. Мицель**, д-р техн. наук, профессор кафедры автоматизированных систем управления Томского государственного университета систем управления и радиоэлектроники, *с замечаниями*: на с. 7 автореферата при оценке достоверности во втором утверждении некорректно ссылаться на самого себя, т.е. указывать на «соответствие результатов теоретических исследований результатам, полученным впервые в рамках данного исследования»; 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. 3. **Е. Н. Старикова**, канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник лаборатории теоретической спектроскопии Института оптики атмосферы им. В. Е. Зуева СО РАН, г. Томск, *с замечаниями*: в автореферате встречаются грамматические ошибки, опечатки по тексту и в формулах; личный вклад автора очень туманно сформулирован. 4. **Г. А. Онопенко**, д-р физ.-мат. наук, доц., профессор кафедры прикладной математики Томского государственного архитектурно-строительного университета, *без замечаний*.

В отзывах указывается, что решение большинства задач по исследованию структуры и свойств веществ, в том числе, газообразных, требует знания и понимания механизмов внутренних физических процессов в атомах и молекулах. В связи с этим тема диссертации, посвященная развитию и усовершенствованию теоретических методов исследования молекул, является актуальной. Н. И. Распоповой на основе на теории неприводимых тензорных систем разработан подход, позволяющий в аналитическом виде получить выражения для тетраэдрических расщеплений для различных полиад взаимодействующих колебательно-вращательных состояний молекул типа сферического волчка; созданы алгоритм и пакет программ SPHETOM, позволяющие решать большой круг вычислительных задач спектроскопии молекул симметрии  $T_d$ , в том числе в автоматическом режиме проводить анализ и описывать тонкую колебательно-вращательную структуру спектров высокого разрешения молекул сферической симметрии; впервые выполнено исследование зарегистрированных спектров высокого разрешения молекул типа сферического волчка  $SiH_4$  и  $GeH_4$  для взаимодействующих состояний диады и пентады. Исследуемые молекулы силана и германа находят широкое применение в различных областях науки и техники: астрофизики, планетологии, задач физической химии, микроэлектроники и многих других, поэтому результаты исследования имеют несомненную научную и практическую ценность.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что **А. Д. Быков** – известный высококвалифицированный специалист в области спектроскопии внутри- и межмолекулярных взаимодействий; **Н. Ф. Зобов** является высококвалифицированным специалистом, обладающим большим опытом в области исследования фундаментальных свойств веществ методами молекулярной спектроскопии; **Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова** является ведущим исследовательским центром, на базе которого проводятся исследования в областях химической физики и спектроскопии молекул.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

*разработан* метод, позволяющий в аналитическом виде описывать сложную колебательно-вращательную структуру спектров высокого разрешения молекул типа сферического волчка;

*создан* алгоритм и пакет программ для решения обратной спектроскопической задачи и расчета колебательно-вращательных спектров данного класса молекул;

*получена* новая физическая информация путем исследования спектров высокого разрешения молекул сферической симметрии  $\text{SiH}_4$  и  $\text{GeH}_4$  для нескольких полиад взаимодействующих состояний.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

*доказано*, что элементы  $G$ -матриц редукции, являющиеся основой расчета квантово-механических энергий и интенсивностей линий и использовавшиеся ранее только в численном виде, могут быть получены в аналитической форме;

применительно к проблематике диссертации результативно *использованы* методы квантовой механики, теории групп, теории углового момента, операторной теории возмущений, теории локальных мод, а также теоремы и результаты теории неприводимых тензорных операторов;

*получены* в аналитической форме элементы  $G$ -матриц редукции, вращательные операторы и волновые функции, позволяющие определять в аналитическом виде величины тетраэдрических расщеплений для различных полиад взаимодействующих состояний. Полученные результаты создают основу для более детального понимания процессов, происходящих в молекулах типа  $\text{XY}_4$  симметрии  $T_d$ , и могут использоваться для дальнейших исследований молекул такого класса.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

*разработана* теоретическая модель, которая дает возможность описывать спектры высокосимметричных молекул на уровне точности близкой к погрешности эксперимента;

*создан* пакет программ «SPHETOM», позволяющий упростить процесс интерпретации сложных колебательно-вращательных спектров молекул типа сферического волчка, производить расчеты спектров высокого разрешения для различных полиад взаимодействующих колебательных состояний, выполнять интерпретацию спектров и решать обратную спектроскопическую задачу для молекул тетраэдрической симметрии в автоматическом режиме;

*получена* новая высокоточная информация о колебательно-вращательных полосах диады и пентады молекул  $^M\text{SiH}_4$  ( $M=28, 29, 30$ ) и  $^M\text{GeH}_4$  ( $M=74, 76$ ), содержащая более 20 тысяч ранее не упоминавшихся в литературе колебательно-вращательных переходов.

**Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования.** Полученные результаты целесообразно использовать при чтении курсов лекций «Теоретические основы молекулярной спектроскопии», «Современные проблемы физики молекул» и «Физика атомов и молекул» в Национальном исследовательском Томском государственном университете и Национальном исследовательском Томском политехническом университете. Разработанный метод исследования тонкой энергетической структуры спектров молекул и вычислительные пакеты программ могут использоваться в организациях, специализирующихся в области спектроскопии высокого разрешения молекул, проблем мониторинга атмосферы и газоанализа, таких как: Национальный исследовательский Томский государственный университет, Институт оптики атмосферы им. В. Е. Зуева СО РАН (г. Томск), Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Санкт-Петербургский государственный университет, Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики РАН (г. Нижний Новгород), Институт спектроскопии РАН (г. Троицк Московской области) и др.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

*теория* используемых моделей и математических методов обладает строгостью и непротиворечивостью и, как следствие, результаты и выводы, полученные на ее основе, согласуются с результатами других авторов и с результатами соответствующих экспериментальных исследований;

*идея базируется* как на известных, так и на оригинальных теоретических методах молекулярной спектроскопии;

*использованы* современные программные среды для разработки алгоритмов и создания программ на языках MAPLE, FORTRAN и MATHEMATICA;

*установлено* как качественное, так и количественное совпадение авторских результатов с результатами, представленными в независимых источниках по данной тематике, в тех случаях, когда такое сравнение является обоснованным.

**Научная новизна исследования заключается в том, что:**

впервые величины тетраэдрических расщеплений колебательно-вращательных состояний получены в аналитическом виде на основе связи неприводимых представлений точечной группы симметрии  $T_d$  с неприводимыми представлениями группы  $SO(3)$ , в то время как ранее в литературе они определялись только численно;

впервые получены в аналитическом виде: элементы  $G$ -матриц редукции для неприводимых представлений группы  $T_d$ ; в симметризованной форме волновые функции колебательных состояний до девятой полиады включительно для молекул типа сферического волчка; выражения для вращательных операторов в группе симметрии  $SO(3)$  и соответствующих редуцированных на группу  $T_d$  операторов до 8-го ранга;

разработан алгоритм и на этой основе создан пакет программ SPHETOM для расчета тонкой колебательно-вращательной структуры спектров высокого разрешения молекул типа сферического волчка;

впервые определены или существенно улучшены спектроскопические параметры для более чем 30 колебательно-вращательных полос молекул  ${}^M\text{GeH}_4$  ( $M=74, 76$ ) и  ${}^M\text{SiH}_4$  ( $M=28, 29, 30$ );

впервые определены параметры эффективного дипольного момента и коэффициенты уширения давлением колебательно-вращательных линий полос сильновзаимодействующих состояний  $\nu_2/\nu_4$  и  $\nu_1/\nu_3$  для молекулы  ${}^M\text{SiH}_4$  ( $M=28, 29, 30$ ).

**Личный вклад соискателя состоит в:** участии в постановке целей и задач, непосредственной разработке аналитического метода исследования тонкой колебательно-вращательной энергетической структуры спектров молекул типа

сферического волчка, математической модели и принципиальных алгоритмических схем программного пакета SPHETOM; создании, апробации и практической реализации пакета компьютерных программ для расчета тонкой колебательно-вращательной энергетической структуры спектров молекул сферической симметрии,  $XU_4$ ; проведении расчётов и интерпретации экспериментальных данных; подготовке публикаций по результатам исследования.

Диссертация отвечает критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней для диссертаций на соискание учёной степени кандидата наук, и, в соответствии с пунктом 9 Положения, является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи теоретического исследования спектров молекул типа сферического волчка, имеющей значение для развития физики молекул.

На заседании 27.09.2018 диссертационный совет принял решение присудить **Распоповой Н. И.** учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 6 докторов наук по специальности 01.04.05 – Оптика, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за – 17, против – нет, недействительных бюллетеней – 1.

Заместитель председателя  
диссертационного совета



Войцеховский  
Александр Васильевич

Учёный секретарь  
диссертационного совета

Пойзнер  
Борис Николаевич

27.09.2018